

538,758

(12)特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局



(43) 国際公開日
2004 年 6 月 24 日 (24.06.2004)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2004/052862 A1

(51) 国際特許分類⁷: C07D 213/74, 401/14, 403/04, 403/14, 417/04, 401/12, 401/04, 403/12, 405/14, 409/14, 417/14, 405/14, 409/14, 417/14, 405/12, 413/04, 413/12, 215/42, 493/04, 493/10, 495/04, 473/16, 251/50, 239/42, A61K 31/55, 31/506, 31/551, 31/4725, 31/517, 315/53, 31/4709, 31/444, 31/519, 31/506, A61P 3/00, 9/00, 25/00, 29/00, 31/00, 31/18, 35/00, 37/00, 37/08, 43/00

茨城県 つくば市 和台 17 番地 2 小野薬品工業株式会社内 Ibaraki (JP). 多田 秀明 (TADA,Hideaki) [JP/JP]; 〒300-4247 茨城県 つくば市 和台 17 番地 2 小野薬品工業株式会社内 Ibaraki (JP). 谷廣 達也 (TANIHIRO,Tatsuya) [JP/JP]; 〒300-4247 茨城県 つくば市 和台 17 番地 2 小野薬品工業株式会社内 Ibaraki (JP).

(21) 国際出願番号: PCT/JP2003/015718

(74) 代理人: 大家 邦久 (OHIE,Kunihisa); 〒103-0013 東京都 中央区 日本橋人形町 2 丁目 2 番 6 号 堀口第 2 ビル 7 階 大家特許事務所 Tokyo (JP).

(22) 国際出願日: 2003 年 12 月 9 日 (09.12.2003)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(81) 指定国 (国内): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2002-357446 2002 年 12 月 10 日 (10.12.2002) JP
特願 2003-162706 2003 年 6 月 6 日 (06.06.2003) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 小野薬品工業株式会社 (ONO PHARMACEUTICAL CO., LTD.) [JP/JP]; 〒541-8526 大阪府 大阪市 中央区 道修町 2 丁目 1 番 5 号 Osaka (JP).

(84) 指定国 (広域): ARIPO 特許 (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ユーロッパ特許 (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI 特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

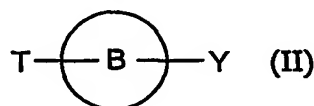
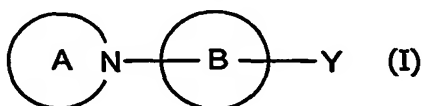
(72) 発明者; および
(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 巾下 広 (HABASHITA,Hiromu) [JP/JP]; 〒618-8585 大阪府 三島郡 島本町 桜井三丁目 1 番 1 号 小野薬品工業株式会社内 Osaka (JP). 小久保 雅也 (KOKUBO,Masaya) [JP/JP]; 〒618-8585 大阪府 三島郡 島本町 桜井三丁目 1 番 1 号 小野薬品工業株式会社内 Osaka (JP). 柴山 史朗 (SHIBAYAMA,Shiro) [JP/JP]; 〒300-4247

添付公開書類:
— 国際調査報告書

2 文字コード及び他の略語については、定期発行される各 PCT ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

(54) Title: NITROGEN-CONTAINING HETEROCYCLIC COMPOUNDS AND MEDICINAL USE THEREOF

(54) 発明の名称: 含窒素複素環化合物およびその医薬用途



same and medicinal compositions containing the same are useful as preventives and/or remedies for various inflammatory diseases, various allergic diseases, acquired immunodeficiency syndrome, infection with human immunodeficiency virus, etc. and agents for regeneration therapy: (I) (II) wherein the ring A represents an optionally substituted nitrogen-containing heterocycle; the ring B represents an optionally substituted homocycle or an optionally substituted heterocycle; Y represents an optionally substituted hydrocarbyl group, an optionally substituted heterocyclic group, an optionally protected amino group, an optionally protected hydroxyl group or an optionally protected mercapto group; and T represents the ring A or an optionally substituted amino group.

(57) Abstract: Because of having an effect of controlling CXCR4, compounds represented by the following general formulae (I) and (II), salts thereof, N-oxides thereof, solvates thereof or prodrugs of the

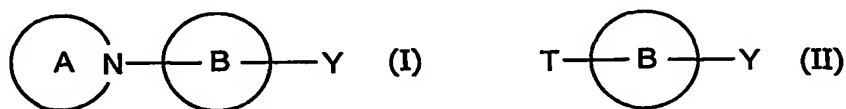
[続葉有]

WO 2004/052862 A1



(57) 要約:

一般式 (I) および (II) で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ、およびそれらを含用してなる医薬組成物はC X C R₄を調節する作用を有し、各種炎症疾患、各種アレルギー性疾患、後天性免疫不全症候群、ヒト免疫不全ウイルス感染症等の予防および／または治療剤、または再生医療用剤として有用である。



(式中、環Aは置換基を有していてもよい含窒素複素環を表わし、環Bは置換基を有していてもよい同素環または置換基を有していてもよい複素環を表わし、Yは置換基を有していてもよい炭化水素基、置換基を有していてもよい複素環基、保護されていてもよいアミノ基、保護されていてもよい水酸基または保護されていてもよいメルカプト基を表わし、Tは、環Aまたは保護されていてもよいアミノ基を表わす。)

明 細 書

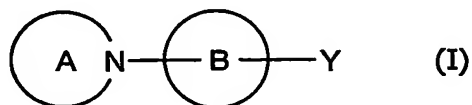
含窒素複素環化合物およびその医薬用途

5 技術分野

本発明は、医薬として有用な CXCR4 調節剤に関する。

さらに詳しく言えば、本発明は

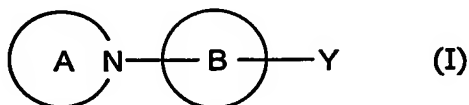
(1) 一般式 (I)



10 (式中、すべての記号は後記と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、その N-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ、

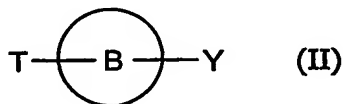
(2) 一般式 (I)



15 (式中、すべての記号は後記と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、その N-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを含有してなる医薬組成物、

(3) 一般式 (II)



20 (式中、すべての記号は後記と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、その N-オキシド体もしくはその溶媒和物、ま

たはそれらのプロドラッグを有効成分とする C X C R 4 調節剤、および
(4) それらの製造方法に関する。

ケモカインは、内因性の白血球走化性、活性化作用を有し、ヘパリン結合性の強い塩基性蛋白質として知られている。現在では、ケモカインは炎症、
5 免疫反応時の特異的白血球の浸潤を制御するのみならず、発生、生理的条件下でのリンパ球のホーミング、血球前駆細胞や体細胞の移動にも関わると考えられている。

血球細胞は種々のサイトカインによってその分化、増殖および細胞死が制御されている。生体内において炎症は局所的にみられ、リンパ球の分化、成熟などはある特定の部位で行なわれている。すなわち、必要とされる種々の
10 細胞がある特定の部位に移動、集積して、一連の炎症や免疫反応が起こる。従って、細胞の分化、増殖や死に加えて、細胞の移動も免疫系にとって必要不可欠な現象である。

生体内での血球細胞の移動は、まず発生過程において、A G M (Aorta Gonad
15 Mesonephros ; 大動脈・性腺・中腎) 領域に始まる造血が胎児肝を経て、骨髄での永久造血へと移行することから始まる。更に、胎児肝、骨髄から胸腺へと、T細胞、胸腺樹状細胞の前駆細胞が移動し、胸腺環境下で細胞分化する。クローン選択を受けたT細胞は二次リンパ組織へ移動し、末梢における免疫反応に参与する。抗原を捕らえて、活性化、分化した皮膚のランゲルハンス
20 細胞は、局所リンパ節のT細胞領域に移動し、樹状突起細胞としてナイーブT細胞を活性化する。メモリーT細胞はリンパ管、血管を経て、再びリンパ節にホーミングする。また、B細胞、腸管上皮内T細胞、 $\gamma\delta$ T細胞、NK T細胞、樹状細胞は、骨髄より胸腺を経ずに移動、分化し、免疫反応に参与する。

25 ケモカインは、このような種々の細胞の移動に深く関与している。例えば、S D F - 1 (Stromal cell derived factor-1 ; ストローマ細胞由来因子-1) およ

びその受容体である C X C R 4 は種々の免疫・炎症反応にも作用している。
例えば、慢性関節リウマチのヒト患者由来の滑膜における C D 4 + T 細胞の
蓄積と活性化に関与していることが報告されている (J. Immunol., 165,
6590-6598 (2000))。さらに、C I A モデルマウスにおいても C X C R 4 阻害薬
5 は関節への白血球の集積を抑制し、関節炎スコアを劇的に減少させた (J.
Immunol., 167, 4648-4692 (2001))。マウス O V A 誘発気道過敏性モデルにおい
て、抗 C X C R 4 抗体は肺間質に集積する好酸球数を減らし、気道過敏性を
抑制した (J. Immunol., 165, 499-508 (2000))。

S D F - 1 とその受容体である C X C R 4 は造血幹細胞の骨髄での維持に
10 重要な働きをしていることも報告されている (J. Exp. Med., 185, 111-120
(1997)、Blood, 97, 3354-3360 (2001))。したがって、S D F - 1 および C X C
R 4 の制御は末梢血への造血幹細胞動員を調節することが期待され、末梢血
幹細胞移植さらには再生移植治療に有用である。

S D F - 1 および C X C R 4 は乳癌、前立腺癌、卵巣癌などの種々の癌細胞
15 浸潤に関与しており (Nature, 410, 50-56 (2001)、Cancer Res., 62, 1832-1837
(2002)、Cancer Res., 62, 5930-5938 (2002))、S C I D マウスへのヒト乳癌細胞
株の移入モデルにおいて抗 C X C R 4 抗体が乳癌細胞の肺への転移を抑制し
た (Nature, 410, 50-56 (2001))。またヒト卵巣上皮性腫瘍において S D F - 1
が高発現することにより、形質性細胞様樹状細胞の蓄積を促進して腫瘍免疫
20 に関与する骨髄樹状細胞の働きを阻害し、腫瘍免疫を抑制している (Nat. Med.,
12, 1339 (2001))。さらに非ホジキンリンパ腫細胞の増殖、移動に関与し、ヒ
ト非ホジキンリンパ腫細胞の N O D / S C I D マウスへの移入モデルにおい
て、抗 C X C R 4 抗体が腫瘍細胞の増殖を抑制し、マウスの死亡率を改善し
た (Cancer Res., 62, 3106-3112 (2002))。

25 S D F - 1 および C X C R 4 は記憶と学習に必須の海馬歯状回顆粒細胞の
形成に重要な役割を果たしており、成人の可塑性と海馬の病態に関連した疾

患、例えばアルツハイマー病や脳卒中、癲癇などの進展に関与している
(Development, 129, 4249-4260 (2002)、Trends Neuroscience, 25, 548-549
(2002))。

5 S D F - 1 および C X C R 4 は糖尿病の進展に関与する自己反応性 B 細胞
の機能に必須であり、N O D マウスに対して、抗 S D F - 1 抗体が血糖値を
減少させ、末梢組織中の成熟 I g M + B 細胞数を減少させた (Immunology, 107,
222-232 (2002))。またヒト動脈硬化プラークで S D F - 1 が高発現し、血小板
を活性化させた (Circ. Res., 86, 131-138 (2000))。

10 また S D F - 1 / C X C R 4 ノックアウトマウスの結果から、S D F - 1
はリンパ球以外に中枢神経組織、心臓、胃腸管の血管の機能に必須であるこ
とが示されている (Nature, 382, 635-639 (1996)、Nature, 393, 591-594 (1998)、
Nature, 393, 595-599 (1998))。このことから、これらの組織の疾患に関与して
いると考えられる。

15 このように、ケモカイン受容体は種々の特異的な細胞において、ある特定
した時期に発現し、そのエフェクター細胞がケモカインの産生される個所に
集積するというメカニズムを通じて、炎症、免疫反応の制御に大きく関与し
ている。

20 ヒト免疫不全ウイルス (以下、H I V と略する。) 感染によって引き起こさ
れる後天性免疫不全症候群 (エイズ (A I D S) と呼ばれている。) は、近年
最もその治療法を切望されている疾患の一つである。主要な標的細胞である
C D 4 陽性細胞に H I V の感染が一度成立すると、H I V は患者の体内で増
殖をくり返し、やがては免疫機能を司る T 細胞を壊滅的に破壊する。この過
程で徐々に免疫機能が低下し、発熱、下痢、リンパ節の腫脹などの様々な免
疫不全状態を示すようになり、カリニ肺炎などの種々の日和見感染症を併発
25 し易くなる。このような状態がエイズの発症であり、カポジ肉腫などの悪性
腫瘍を誘発し、重篤化することはよく知られている。

現在エイズに対する各種の予防および／または治療方法としては、例えば、
(1) 逆転写酵素阻害薬やプロテアーゼ阻害薬の投与によるH I Vの増殖抑制、(2) 免疫賦活作用のある薬物の投与による日和見感染症の予防、緩和などが試みられている。

5 H I Vは、免疫系の中樞を司るヘルパーT細胞に主に感染する。その際、
T細胞の膜上に発現している膜蛋白C D 4を利用することは、1985年より知られている (Cell, 52, 631 (1985))。C D 4分子は433個のアミノ酸残基
からなり、成熟ヘルパーT細胞以外にマクロファージ、一部のB細胞、血管
内皮細胞、皮膚組織のランゲルハンス細胞、リンパ組織にある樹状細胞、中
10 枢神経系のグリア細胞などで発現が見られる。しかし、C D 4分子のみでは
H I Vの感染が成立しないことが明らかになるにつれて、H I Vが細胞に感
染する際に関わるC D 4分子以外の因子が存在する可能性が示唆されるよう
になった。

1996年にC D 4分子以外のH I V感染にかかわる因子としてフージン
15 (Fusin) という細胞膜蛋白が同定された (Science, 272, 872 (1996))。このフー
ジン分子は、S D F-1の受容体、すなわちC X C R 4であることが証明さ
れた。更に、イン・ビトロ (in vitro) でS D F-1が、T細胞指向性 (X 4)
H I Vの感染を特異的に抑制することも証明された (Nature, 382, 829 (1996)、
Nature, 382, 833 (1996))。すなわち、S D F-1がH I Vより先にC X C R 4
20 に結合することによって、H I Vが細胞に感染するための足掛かりを奪い、
H I Vの感染が阻害されたと考えられる。

また同じ頃、別のケモカイン受容体であり、R A N T E S、M I P-1 α 、
M I P-1 β の受容体であるC C R 5も、マクロファージ指向性 (R 5) H
I Vが感染する際に利用されることが発見された (Science, 272, 1955 (1996))。
25 従って、H I VとC X C R 4やC C R 5を奪い合うことのできるもの、あ
るいはH I Vウイルスに結合し、該ウイルスがC X C R 4やC C R 5に結合

できない状態にさせるものは、H I V感染阻害薬となり得る可能性がある。
また当初、H I V感染阻害薬として発見された低分子化合物が、実はC X C
R 4の拮抗薬であることが示された例もある (Nature Medicine, 4, 72 (1998))。

以上から、ケモカインおよびケモカイン受容体は、炎症、免疫疾患または
5 H I V感染に深く関与している。C X C R 4調節作用を有する化合物は、例
えば、炎症・免疫性疾患、アレルギー性疾患、感染症、特にH I V感染およ
びそれに随伴する疾患、精神・神経性疾患、脳疾患、心・血管性疾患、代謝
性疾患、癌疾患の治療または予防に有効である。また、細胞医療ならびに再
生医療にも有用である。細胞医療には、例えば末梢血幹細胞動員、遺伝子治
療の目的を含む幹細胞のイン・ビトロ (in vitro) またはイン・ビボ (in vivo)
10 増幅が含まれる。再生医療には骨髄移植、末梢血幹細胞移植、組織修復を含
めた各臓器移植などの移植医療が含まれる。移植医療用剤とは、骨髄移植、
末梢血幹細胞移植、あるいは各臓器移植時に使用する剤である。移植医療用
剤としては感染防御剤、または免疫抑制剤などが挙げられる。さらに再生医
療における治療効果の補完および／または増強を目的とする剤も含まれる。
15 移植医療用剤は、例えば幹細胞を骨髄から末梢血に遊走させたり、白血球を
急速に正常値まで高める作用を有する。

炎症・免疫性疾患としては、例えば、慢性関節リウマチ、関節炎、痛風、
移植臓器拒絶、移植片対宿主病 (G V H D)、腎炎、乾癬、鼻炎、結膜炎、多
20 発性硬化症、潰瘍性大腸炎、クローン病、細菌感染に伴うショック、肺繊維
症、全身性応答症候群 (S I R S)、急性肺障害、糖尿病などが挙げられる。

アレルギー性疾患としては、例えば、喘息、アトピー性皮膚炎、鼻炎、結
膜炎などが挙げられる。

感染症、特にH I V感染およびそれに随伴する疾患としては、例えば、後
25 天性免疫不症候群 (A I D S)、カンジダ症、カリニ肺炎、サイトメガロウィ
ルス網膜炎、カポジ肉腫、悪性リンパ腫、エイズ脳症、細菌性敗血症などが

挙げられる。

精神・神経性疾患、脳疾患としては、例えば、アルツハイマー病を含む痴呆症、パーキンソン病、脳卒中、脳梗塞、脳出血、てんかん、統合性失調症、末梢神経障害などが挙げられる。

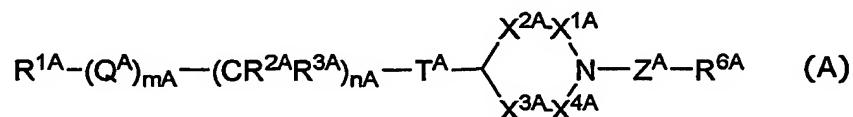
5 心・血管性疾患としては、例えば、動脈硬化、虚血再灌流傷害、高血圧、心筋梗塞、狭心症、心不全などが挙げられる。

代謝性疾患としては、例えば、糖尿病、骨粗鬆症、前立腺肥大、頻尿などが挙げられる。

10 癌疾患としては、例えば、乳癌、悪性リンパ腫等の悪性腫瘍、癌転移、放射線療法／化学療法後の骨髄抑制または血小板減少症などが挙げられる。

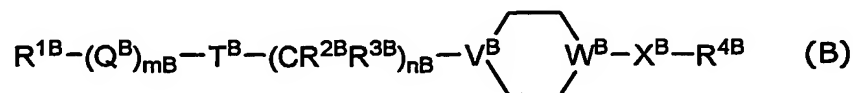
背景技術

一般式 (A)



15 で示されるピペラジンまたはピペリジン誘導体がケモカイン受容体調節剤（特にCCR1、CCR3）であり、炎症性疾患、自己免疫疾患、胃腸障害、HIV疾患、全身性疾患などの治療に有用であると記載されている（WO01/14333号パンフレット参照）。

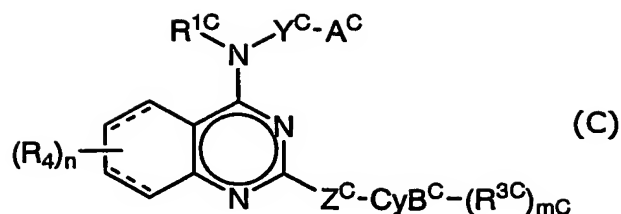
一般式 (B)



20

で示される1,4-ピペリジン誘導体がケモカイン受容体関連疾患の治療に有用であると記載されている（WO00/58305号パンフレット参照）。

一般式 (C)



で示されるキナゾリン誘導体が c GMP ホスホジエステラーゼ阻害および T X A 2 阻害作用を有することが記載されている(特開平 6-192235 号公報参照)。

N- [4- (4-モルホリニル) -2-キナゾリニル] -1, 2-エタン
 5 ジアミン・二塩酸塩 (CAS No. 59870-53-0) N, N-ジエチル-N' - [2-
 (1-ピロリジニル) -4-キナゾリニル] -1, 2-エタンジアミン (CAS
 No. 59870-50-7) および N, N-ジエチル-N' - [2- (1-ピロリジニル)
 -4-キナゾリニル] -1, 2-エタンジアミン・二塩酸塩 (CAS No.
 59870-51-8) が血栓症阻害作用を有することが開示されている (米国特許第
 10 3,956,495 号明細書参照)。

N, N-ジメチル-N' - [2- (4-フェニル-1-ピペリジニル) -
 4-ピリミジニル] -1, 2-エチレンジアミン (CAS No. 131039-38-8) が
 神経系の薬剤として記載されている (特開平 3-14568 号公報参照)。

N- [(3, 4-ジヒドロ-2 H-1-ベンゾピラン-2-イル) メチル]
 15 -N' - [2- (1-ピペリジニル) -4-ピリミジニル] -1, 3-プロ
 パンジアミン・シュウ酸塩 (CAS No. 169747-23-3) が血管収縮作用を有する
 ことが記載されている (WO95/05383 号パンフレット参照)。

蛍光漂白剤が記載されており、その中に 7- [4- [4, 6-ビス (ヘキ
 サヒドロ-1 H-アゼピン-1-イル) -1, 3, 5-トリアジン-2-イ
 20 ル] アミノ-2 H-1, 2, 3-トリアゾール-2-イル] -3-フェニル
 -2 H-1-ベンゾピラン-2-オン (CAS No. 19695-38-6) が記載されてい
 る (独国特許出願公開 1794396 号明細書参照)。

N- [4- (ヘキサヒドロ-1 H-アゼピン-1-イル) チエノ [3, 2

ーd]ピリミジン-2-イル-1, 4-ブタンジアミン (CAS No.31895-98-4) が記載されている (特公昭 51-9759 号公報参照)。

その他、N- [(3, 4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-2-イル)メチル]-N'- [2-(1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1, 3-プロパンジアミンが CAS No. 169747-22-2、4-エトキシ-6-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミンが CAS No.295344-71-7、4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-6-メチル-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミンが CAS No. 332167-02-9、4-クロロ-6-(ヘキサヒドロ-1H)-アゼピン-1-イル)-N-[2-(4-モルホリニル)エチル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミンが CAS No.337484-66-9、4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-6-メトキシ-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミンが CAS No.384845-62-9 として知られている。

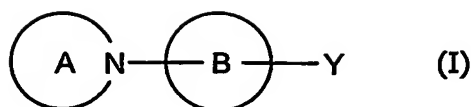
発明の開示

各種炎症疾患、各種アレルギー性疾患、後天性免疫不全症候群、ヒト免疫不全ウイルス感染症等の予防および／または治療剤、または再生医療用剤は医薬品として有用であり、安全な CXCR4 調節剤の開発が切望されている。

本発明者らは、CXCR4 に結合する化合物を見出すべく鋭意研究した結果、一般式 (I) および (II) で示される化合物、その塩、その N-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグが CXCR4 の作用を調節すること、ならびにその化合物が各種疾患の予防および／または治療剤として有用であることを見出し、本発明を完成した。

本発明は、

[1] 一般式 (I)



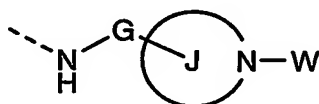
- (式中、環Aは置換基を有していてもよい含窒素複素環を表わし、環Bは置換基を有していてもよい同素環または置換基を有していてもよい複素環を表わし、Yは置換基を有していてもよい炭化水素基、置換基を有していてもよい複素環基、保護されていてもよいアミノ基、保護されていてもよい水酸基または保護されていてもよいメルカプト基を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ、

- 10 [2] 環Aが置換基を有していてもよい5～10員含窒素複素環である前項[1]記載の化合物、

[3] 環Bが置換基を有していてもよい含窒素複素環である前項[1]記載の化合物、

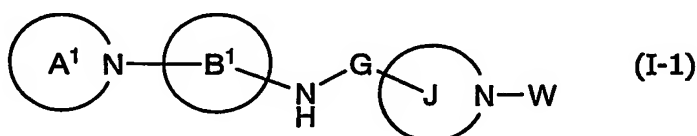
[4] Yが



15

(式中、Gは結合手または主鎖の原子数1～3のスペーサーを表わし、環Jは置換基を有していてもよい4～7員含窒素複素環を表わし、Wは水素原子、置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を表わす。)である前項[1]記載の化合物、

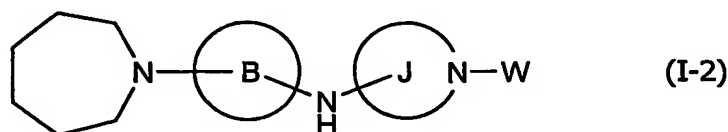
- 20 [5] 一般式 (I-1)



(式中、環A¹は置換基を有していてもよい5～10員含窒素飽和複素環または置換基を有していてもよい1個の二重結合を含有する5～10員含窒素複素環を表わし、環B¹は置換基を有していてもよい6～11員含窒素単環または二環式複素環を表わし、その他の記号は前項[4]記載の記号と同じ意味

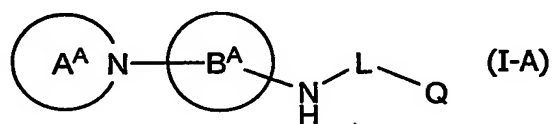
5 を表わす。)である前項[1]記載の化合物、

[6] 一般式(I-2)



(式中、すべての記号は前項[1]および[4]記載の記号と同じ意味を表わす。)である前項[1]記載の化合物、

10 [7] 一般式(I-A)

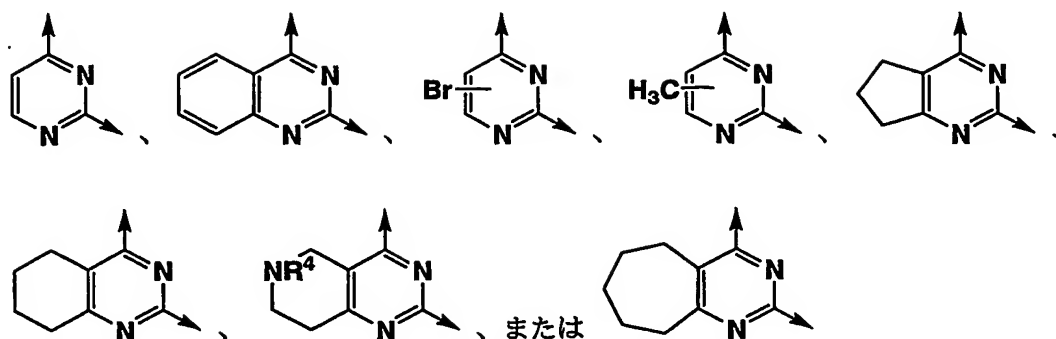


(式中、環A^Aは少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、4～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式

15 複素環を表わし、

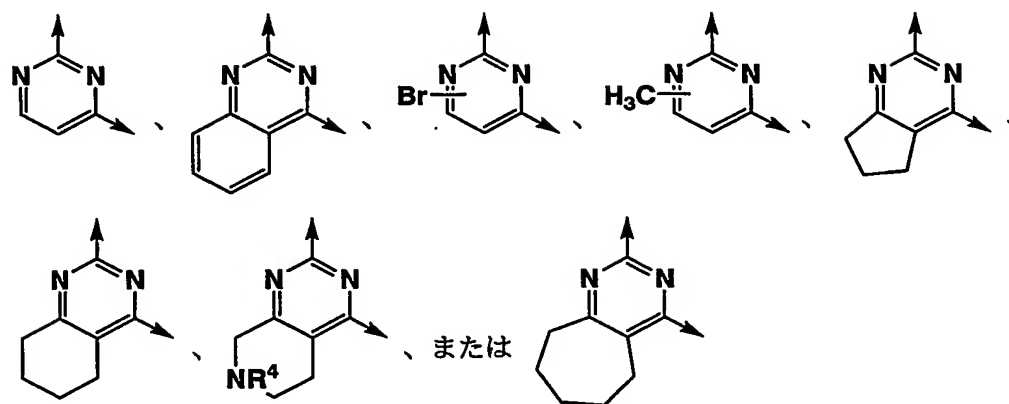
環B^AはB^{A1}またはB^{A2}を表わし、

B^{A1}は



を表わし、

B^{A2} は



- 5 (基中、 R^4 は、(i) 水素原子、(ii) 1～5個の R^{10} によって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル (iii) 1～5個の R^3 によって置換されてもよいC3～8炭素環、(iv) 1～5個の R^3 によって置換されてもよい、1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の複素環、(v)
- 10 COR^5 (基中、 R^5 はC1～15アルキル、C2～15アルケニル、C2～15アルキニルまたはフェニルを表わす。)、または (vi) $COOR^6$ (基中、 R^6 はC1～15アルキル、C2～15アルケニル、C2～15アルキニルまたはフェニルを表わす。)) を表わし、上向きの矢印は環 A^A との結合部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わす。)) を表わし、
- 15 わし、

- Lは、(1) 結合手、(2) C 1～8アルキレン、C 2～8アルケニレンもしくはC 2～8アルキニレン (該アルキレン、アルケニレンおよびアルキニレンはそれぞれ1～5個の R^{10} によって置換されてもよい。)、または(3) R^3 によって置換されてもよいC 3～8炭素環を表わし、
- 5 Qは、(1) NR^1R^2 (基中、 R^1 および R^2 はそれぞれ独立して、(i) 水素原子、(ii) 1～5個の R^{10} によって置換されてもよいC 1～15アルキル、C 2～15アルケニルもしくはC 2～15アルキニル (iii) 1～5個の R^3 によって置換されてもよいC 3～8炭素環、または(iv) 1～5個の R^3 によって置換されてもよい、1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有する5～15員の複素環を表わす。) または(2)
- 10 環C (環Cは少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の複素環を表わし、環Cは1～5個の R^3 によって置換されてもよい。) を表わし、
- 15 複数の R^3 は、それぞれ独立して(1) C 1～15アルキル、C 2～15アルケニルまたはC 2～15アルキニル (該アルキル、アルケニルおよびアルキニルは1～5個の R^{10} によって置換されてもよい。)、(2) オキソ、または(3) R^{10} を表わし、
- 複数の R^{10} は、それぞれ独立して(1) OR^{11} 、(2) $OCOR^{12}$ 、(3) $OCOOR^{13}$ 、(4) $NR^{14}R^{15}$ 、(5) $NR^{16}COR^{12}$ 、(6) $NR^{16}CONR^{14}R^{15}$ 、(7) $NR^{16}COOR^{13}$ 、(8) $COOR^{13}$ 、(9) COR^{12} 、(10) $CONR^{14}R^{15}$ 、(11) SO_2R^{12} 、(12) SOR^{22} 、(13) $SO_2NR^{24}R^{25}$ 、(14) $NR^{16}SO_2R^{12}$ 、(15) $B(OH)_2$ 、(16) SR^{11} 、(17) ハロゲン原子、(18) ニトロ、(19) シアノ、または(20)
- 25 環D (上記の基中、 R^{11} は(i) 水素原子、(ii) C 1～15アルキル、C 2～15アルケニルもしくはC 2～15アルキニル (該アルキル、アルケニル

- およびアルキニルは1～5個のハロゲン原子、 $\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ 、 OR^{21} 、 SR^{21} 、 COOR^{13} 、または環Dによって置換されてもよい。)、または (iii) 環Dを表わし、
- R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、それぞれ独立して (i) 水素原子、
- 5 (ii) 環Dによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル、または (iii) 環Dを表わし、
- 環Dは、C3～15単環、二環もしくは三環式炭素環、または1～4個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の単環、二環もしくは三環式複素環を表わし、
- 10 また、環Dは、以下の(1)～(22)から選択される1～5個の基によって置換されてもよい；
- (1) C1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル(該アルキル、アルケニルおよびアルキニルは1～5個の OR^{21} 、 OCOR^{22} 、 OCOOR^{23} 、 $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{COR}^{22}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{COOR}^{23}$ 、 COOR^{23} 、 COR^{22} 、 $\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 SO_2R^{22} 、 SOR^{22} 、 $\text{SO}_2\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{SO}_2\text{R}^{22}$ 、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 SR^{21} 、ハロゲン原子、ニトロまたはシアノによって置換されてもよい。)、(2) オキソ、(3) OR^{21} 、(4) OCOR^{22} 、(5) OCOOR^{23} 、(6) $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(7) $\text{NR}^{26}\text{COR}^{22}$ 、(8) $\text{NR}^{26}\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(9) $\text{NR}^{26}\text{COOR}^{23}$ 、(10) COOR^{23} 、(11) COR^{22} 、(12) $\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(13) SO_2R^{22} 、(14) SOR^{22} 、(15) $\text{SO}_2\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(16) $\text{NR}^{26}\text{SO}_2\text{R}^{22}$ 、(17) $\text{B}(\text{OH})_2$ 、(18) SR^{21} 、(19) ハロゲン原子、(20) ニトロ、(21) シアノまたは(22) 環E(上記の基中、 R^{21} は(i) 水素原子、(ii) COR^{22} 、 $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ もしくは環Eによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニルまたは(iii) 環Eを表わし、
- 25

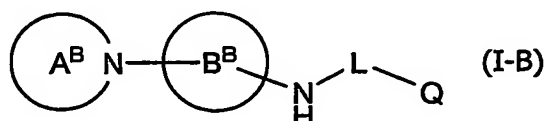
- R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} および R^{26} は、それぞれ独立して (i) 水素原子、
 (ii) 環Eによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケ
 ニルもしくはC2～15アルキニル、または (iii) 環Eを表わし、
 環Eは、C3～15単環、二環もしくは三環式炭素環、または1～4個の窒
 5 素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～
 15員の単環、二環もしくは三環式複素環を表わし、
 また、環Eは1～5個の (i) フェニルによって置換されてもよいC1～1
 5アルキル、(ii)ハロゲン原子、(iii)フェニル、(iv)C1～15アルコキシ、
 (v) 水酸基、(vi) アミノ基、(vii) モノ (C1～8アルキル) アミノ基ま
 10 たは (viii) ジ (C1～8アルキル) アミノ基によって置換されてもよい。) を表わし、
 環A^aは、1～5個のR^aによって置換されてもよく、
 環B^aは、1～5個のR^bによって置換されてもよく、
 R^aおよびR^bは、それぞれ独立してR³に示される基と同じ基を表わす。
 15 ただし、以下の(1)～(6)の化合物を除く：
 (1) N-[4-(4-モルホリニル)-2-キナゾリニル]-1,2-エ
 タンジアミン・二塩酸塩、
 (2) N,N-ジメチル-N'-[2-(4-フェニル-1-ピペリジニル)
 -4-ピリミジニル]-1,2-エチレンジアミン、
 20 (3) N-[(3,4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-2-イル)メチ
 ル]-N'-[2-(1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1,3-
 プロパンジアミン、
 (4) N-[(3,4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-2-イル)メチ
 ル]-N'-[2-(1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1,3-
 25 プロパンジアミン・シュウ酸塩、
 (5) N,N-ジエチル-N'-[2-(1-ピロリジニル)-4-キナゾ

リニル] - 1, 2-エタンジアミンおよび

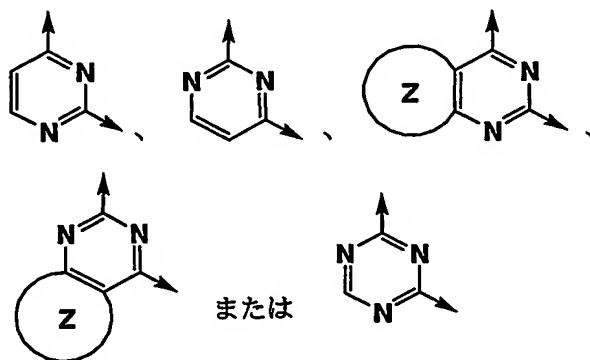
(6) N, N-ジエチル-N' - [2 - (1-ピロリジニル) - 4-キナゾ
リニル] - 1, 2-エタンジアミン・二塩酸塩。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、ま
5 たはそれらのプロドラッグ、

[8] 一般式 (I-B)



(式中、環A^Bは少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素
原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、
10 7～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式
複素環を表わし、環B^Bは



(基中、環ZはC 5～10単環もしくは二環式炭素環または1～2個の窒素
原子、1個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～
15 10員の単環もしくは二環式複素環を表わし、上向きの矢印は環A^Bとの結合
部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わ
す。)

を表わし、環A^Bは1～5個のR^aによって置換されてもよく、環B^Bは1～5

個のR^bによって置換されてもよく、R^a、R^bおよびその他の記号は前項[7]記載の記号と同じ意味を表わす。

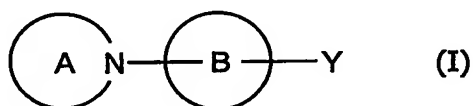
ただし、以下の(1)～(7)の化合物を除く；

- (1) N-[4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)チエノ[3, 2-d]ピリミジン-2-イル]-1, 4-ブタンジアミン・二塩酸塩、
- (2) 7-[4-[4, 6-ビス(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-1, 3, 5-トリアジン-2-イル]アミノ-2H-1, 2, 3-トリアゾール-2-イル]-3-フェニル-2H-1-ベンゾピラン-2-オン、
- (3) 4-エトキシ-6-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- (4) 4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-6-メチル-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- (5) 4-クロロ-6-(ヘキサヒドロ-1H)-アゼピン-1-イル)-N-[2-(4-モルホリニル)エチル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- (6) 4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)-6-メトキシ-N-[3-(4-モルホリニル)プロピル]-1, 3, 5-トリアジン-2-アミンおよび
- (7) N-[4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)チエノ[3, 2-d]ピリミジン-2-イル]-1, 4-ブタンジアミン。

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ、

[9] (1) N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)エタ

- ン-1, 2-ジアミン、
- (2) N^1 -(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)- N^2 , N^2 -ジメチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (3) 4-アゼパン-1-イル-N-((3S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン、
- 5 (4) 4-アゼパン-1-イル-N-((3S)-1-ベンジルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン、
- (5) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、
- 10 (6) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、
- (7) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、
- (8) 4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピペリジン-1-イルシクロヘキサノールまたは
- 15 (9) (3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロヘキシルカルボニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミンである前項 [1]、[7] または [8] 記載の化合物、
- [10] 一般式 (I)



20

(式中、すべての記号は前項 [1] 記載の記号と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを含有してなる医薬組成物、

[11] CXCR4調節剤である前項 [10] 記載の医薬組成物、

[12] CXCR4調節剤がCXCR4拮抗剤である前項[11]記載の医薬組成物、

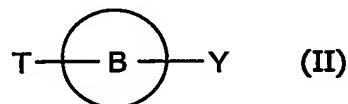
[13] ヒト免疫不全ウイルス感染の予防および／または治療剤である前項[12]記載の医薬組成物、

5 [14] 後天性免疫不全症候群の予防および／または治療剤である前項[13]記載の医薬組成物、

[15] 再生医療用剤である前項[10]記載の医薬組成物、

[16] 再生医療用剤が移植医療用剤である前項[15]記載の医薬組成物、

10 [17] 一般式(II)



(式中、Tは、 $\text{A} - \text{N} -$ または $\begin{matrix} \text{R}^{101} \\ \text{R}^{102} \end{matrix} \text{N} -$ (式中、 R^{101} および R^{102}

²は、それぞれ独立して、水素原子または置換基を有していてもよい炭化水素基を表わし、環Aは前項[1]記載の記号と同じ意味を表わす。)

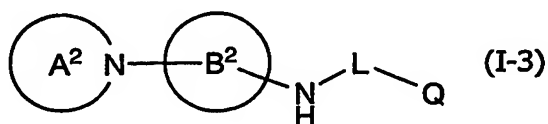
15 を表わし、

その他の記号は前項[1]記載の記号と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤、

[18] CXCR4調節剤がCXCR4拮抗剤である前項[17]記載の
20 剤、

[19] 一般式(I-3)



(式中、環A²は少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、4～15員の単環、二環または三環式複素環を表わし、環B²は少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の単環、二環または三環式複素環を表わし、環A²は1～5個のR^aによって置換されてもよく、環B²は1～5個のR^bによって置換されてもよく、R^a、R^bおよびその他の記号は前項〔7〕記載の記号と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤、

〔20〕 CXCR4拮抗剤である前項〔19〕記載のCXCR4調節剤、

〔21〕 前項〔7〕に記載の一般式(I-A)で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤、

〔22〕 CXCR4拮抗剤である前項〔21〕記載のCXCR4調節剤、

〔23〕 前項〔8〕に記載の一般式(I-B)で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤、

〔24〕 CXCR4拮抗剤である前項〔23〕記載のCXCR4調節剤、

〔25〕 炎症・免疫性疾患、アレルギー性疾患、感染症、HIV感染もしくはそれに随伴する疾患、精神・神経性疾患、脳疾患、心・血管性疾患、代謝性疾患または癌疾患の予防および／または治療剤である前項〔17〕または〔19〕記載のCXCR4調節剤、

〔26〕 HIV感染もしくはそれに随伴する疾患の予防および／または治療剤である前項〔25〕記載のCXCR4調節剤、

〔27〕 再生医療用である前項〔17〕または〔19〕記載のCXCR4

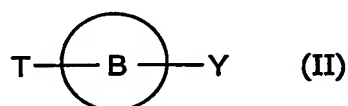
調節剤、

- [2 8] 前項 [1]、[7]、[8] または [1 7] 記載の化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグと、逆転写酵素阻害薬、プロテアーゼ阻害薬、CCR 2 拮抗薬、CCR 3 拮抗薬、
- 5 CCR 4 拮抗薬、CCR 5 拮抗薬、フュージョン阻害薬、HIV-1 の表面抗原に対する抗体、およびHIV-1 のワクチンから選択される1種または2種以上とを組み合わせる医薬、

- [2 9] 逆転写酵素阻害薬が、ジドブジン、ジダノシン、ザルシタビン、スタブジン、ラミブジン、アバカビル、アデフォビル、ジビボキシル、エン
- 10 トリシタビン、テノフォビル、ネビラピン、デラビルジン、エファビレンツおよびカブラヴィリンから選択される1種または2種以上である前項 [2 8] 記載の医薬、

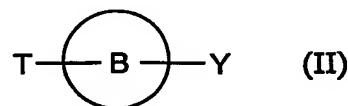
- [3 0] プロテアーゼ阻害薬が、インジナビル、リトナビル、ネルフィナビル、サキナビル、アンプリナビル、ロピナビルおよびティプラナビルから
- 15 選択される1種または2種以上である前項 [2 8] 記載の医薬、

[3 1] 一般式 (II)



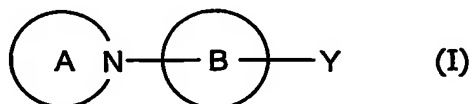
- (式中、すべての記号は前項 [1] および [1 7] 記載の記号と同じ意味を表わす。) で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒
- 20 和物、またはそれらのプロドラッグの有効量を哺乳動物に投与することを特徴とする哺乳動物におけるCXCR 4 を拮抗する方法、

[3 2] CXCR 4 拮抗剤を製造するための一般式 (II)



(式中、すべての記号は前項 [1] および [17] 記載の記号と同じ意味を表わす。) で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグの使用、および

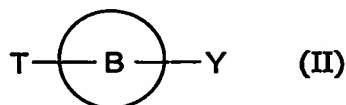
[33] 一般式 (I)



5

(式中、すべての記号は前項 [1] 記載の記号と同じ意味を表わす。)

および (II)



10 (式中、すべての記号は前項 [1] および [17] 記載の記号と同じ意味を表わす。) で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグの製造方法に関する。

詳細な説明

15 本発明の一般式 (I) で示される化合物中、環Aで示される「置換基を有していてもよい含窒素複素環」における「含窒素複素環」とは、一般式 (I) の環Aにおいて表示されている窒素原子以外に、窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選ばれる1～6個のヘテロ原子を含んでいてもよい単環、二環または三環式複素環を表わす。「含窒素複素環」としては、例えば「3～15員含窒素不飽和単環、二環または三環式複素環」、「3～15員含窒素飽和単環、二環または三環式複素環」等が挙げられる。

20 「3～15員含窒素不飽和単環、二環または三環式複素環」としては、例えばピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、

アゼピン、ジアゼピン、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、ベンゾイミダゾール、ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、 β -カルボリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ペリミジン、ピロリン、イミダゾリン、トリアゾリン、テトラゾリン、

5 ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾール、ジヒドロチアゾール、ジヒドロイ

10 ソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、

15 インドリン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、

20 テトラヒドロシンノリン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、ジヒドロベンゾイミダゾール、ジヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、ジヒドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾオキサゼピン、

25 ジヒドロカルバゾール、テトラヒドロカルバゾール、ジヒドロアクリジン、テトラヒドロアクリジン、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒドロアゾニ

ン、ヘキサヒドロジアゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒドロアゼシン、オクタヒドロジアゼシン等が挙げられる。

また、「3～15員含窒素飽和単環、二環または三環式複素環」としては、例えばアジリジン、アゼチジン、ピロリジン、イミダゾリジン、トリアゾリジン、テトラゾリジン、ピラゾリジン、ピペリジン、ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、テトラヒドロオキサゾール（オキサゾリジン）、テトラヒドロイソオキサゾール（イソオキサゾリジン）、テトラヒドロチアゾール（チアゾリジン）、テトラヒドロイソチアゾール（イソチアゾリジン）、テトラヒドロフラザン、テトラヒドロオキサジアゾール（オキサジアゾリジン）、テトラヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジアジン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロチアジアゾール（チアジアゾリジン）、テトラヒドロチアジン、テトラヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、パーヒドロインダゾール、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パーヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロカルバゾール、パーヒドロアクリジン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、アザウンデカン、アザドデカン、アザトリデカン、アザテトラデカン、アザペンタデカン、パーヒドロジアゾシン、パーヒドロジアゾニン、パーヒドロジアゼシン、ジアザウンデカン、ジアザドデカン、ジアザトリデカン、ジアザテトラデカン、ジアザペンタデカン、パーヒドロインドール、パーヒドロイソインドール、パーヒドロ β -カルボリン、パーヒドロフェナジン、パーヒドロフェノチアジン、パーヒドロフェノキサジン、パーヒドロフェナントリジン、パーヒドロ

フェナントロリン、パーヒドロペリミジン、アザビシクロ [3. 2. 2] ノ
ナン、アザビシクロ [3. 3. 2] デカン、アザビシクロ [2. 2. 2] オ
クタン、アザビシクロ [3. 3. 3] ウンデカン、アザビシクロ [4. 3.
3] ドデカン、アザビシクロ [4. 4. 3] トリデカン、アザビシクロ [4.
5 4. 4] テトラデカン等が挙げられる。

環Aで示される「含窒素複素環」として好ましくは、「5～10員含窒素複
素環」が挙げられる。具体的には、例えば「5～10員含窒素不飽和複素環」
として、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾー
ル、アゼピン、ジアゼピン、インドール、イソインドール、インダゾール、
10 プリン、ベンゾイミダゾール、ベンゾトリアゾール、ピロリン、イミダゾリ
ン、トリアゾリン、テトラゾリン、ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テトラ
ヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリ
ミジン、テトラヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリ
ダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、
15 テトラヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾー
ル、ジヒドロチアゾール、ジヒドロイソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジ
ヒドロオキサジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、
ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼ
ピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロ
20 チアジン、ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチア
ゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、インドリ
ン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒ
ドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒド
ロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒ
25 ドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジ
ヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラ

ヒドロシンノリン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、
ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾ
ール、ジヒドロベンゾイミダゾール、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒドロ
アゾニン、ヘキサヒドロジアゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒド
5 ロアゼシン、オクタヒドロジアゼシン等が挙げられる。

また、「5～10員含窒素飽和複素環」として、例えばピロリジン、イミダ
ゾリジン、トリアゾリジン、テトラゾリジン、ピラゾリジン、ピペリジン、
ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジン、パーヒドロア
ゼピン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、テトラヒドロオキサ
10 ザール（オキサゾリジン）、テトラヒドロイソオキサゾール（イソオキサゾリ
ジン）、テトラヒドロチアゾール（チアゾリジン）、テトラヒドロイソチアゾ
ール（イソチアゾリジン）、テトラヒドロフラザン、テトラヒドロオキサジア
ゾール（オキサジアゾリジン）、テトラヒドロオキサジン、テトラヒドロオキ
サジアジン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、テト
15 ラヒドロチアジアゾール（チアジアゾリジン）、テトラヒドロチアジン、テト
ラヒドロチアジアジン、パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、
モルホリン、チオモルホリン、パーヒドロインダゾール、パーヒドロキノリ
ン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒドロナフチリ
ジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パーヒドロシンノ
20 リン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、パー
ヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、パ
ーヒドロジアゾシン、パーヒドロジアゾニン、パーヒドロジアゼシン、パー
ヒドロインドール、パーヒドロイソインドール、アザビシクロ [3. 2. 2]
ノナン、アザビシクロ [3. 3. 2] デカン、アザビシクロ [2. 2. 2]
25 オクタン等が挙げられる。

さらに、環Aとして好ましくは、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシ

ン、ピペリジン、 等が挙げられる。

環Aは1～5個の R^a (R^a は R^3 と同じ意味を表わし、 R^3 は前記と同じ意味を表わす。)で置換されていてもよい。

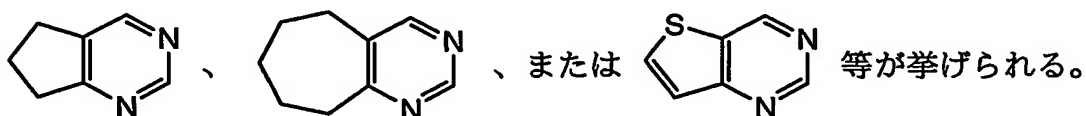
- 環Bで示される「置換基を有していてもよい同素環」における「同素環」
- 5 としては、例えば「環状炭化水素」等が挙げられる。「環状炭化水素」としては、「不飽和環状炭化水素」または「飽和環状炭化水素」が挙げられる。「飽和環状炭化水素」としては、例えば、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、シクロオクタン、シクロノナン、シクロデカン、シクロウンデカン、シクロドデカン、シクロトリドデカン、シクロテトラデカン、シクロペンタデカン等のシクロアルカン、さら
- 10 に、例えばパーヒドロペンタレン、パーヒドロアズレン、パーヒドロインデン、パーヒドロナフタレン、パーヒドロヘプタレン、スピロ[4.4]ノナン、スピロ[4.5]デカン、スピロ[5.5]ウンデカン、ビスクロ[2.2.1]ヘプタン、ビスクロ[3.1.1]ヘプタン、ビスクロ[2.2.2]オクタン、アダマンタン、ノルアダマンタン等の「3～15員飽和環状炭化水素」等が挙げられる。「不飽和環状炭化水素」としては、例えばシクロペンテン、シクロヘキセン、シクロヘプテン、シクロオクテン、シクロペンタジエン、シクロヘキサジエン、シクロヘプタジエン、シクロオクタジエン等のシクロアルケン、さらに、例えばベンゼン、ペンタレン、アズレン、イン
- 15 デン、インダン、ナフタレン、ジヒドロナフタレン、テトラヒドロナフタレン、ヘプタレン、ビフェニレン、a s-インダセン、s-インダセン、アセナフテン、アセナフチレン、フルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、ビスクロ[2.2.1]ヘプター2-エン、ビスクロ[3.1.1]ヘプター2-エン、ビスクロ[2.2.2]オクター2-エン等の
- 20 「3～15員不飽和環状炭化水素」等が挙げられる。
- 25

環Bで示される「置換基を有していてもよい複素環」における「複素環」とは、窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選ばれる1～7個のヘテロ原子を含んでいてもよい単環、二環または三環式複素環を表わす。「複素環」としては、例えば「3～15員不飽和単環、二環または三環式複素環」、「3～15員飽和単環、二環または三環式複素環」等が挙げられる。

「3～15員不飽和単環、二環または三環式複素環」としては、例えばピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、アゼピン、ジアゼピン、フラン、ピラン、オキセピン、チオフェン、チオピラン、チエピン、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジチアナフタレン、インダゾール、キノリン、イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プテリジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、クロメン、ベンゾオキセピン、ベンゾオキサゼピン、ベンゾオキサジアゼピン、ベンゾチエピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、 β -カルボリン、アクリジン、フェナジン、ジベンゾフラン、キサンテン、ジベンゾチオフェン、フェノチアジン、フェノキサジン、フェノキサチイン、チアンスレン、フェナントリジン、フェナントロリン、ペリミジン、ピロリン、イミダゾリン、トリアゾリン、テトラゾリン、ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、ジ

ヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、テトラヒドロトリアジン、ジ
ヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒド
ロジアゼピン、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、ジヒドロオキセピン、テ
トラヒドロオキセピン、ジヒドロチオフエン、ジヒドロチオピラン、ジヒド
5 ロチエピン、テトラヒドロチエピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソ
オキサゾール、ジヒドロチアゾール、ジヒドロイソチアゾール、ジヒドロフ
ラザン、ジヒドロオキサジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサ
ジアジン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオ
キサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、
10 ジヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒ
ドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、
インドリン、イソインドリン、ジヒドロベンゾフラン、ジヒドロイソベンゾ
フラン、ジヒドロベンゾチオフエン、ジヒドロイソベンゾチオフエン、ジヒ
ドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、ジヒドロイ
15 ソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒド
ロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、ジヒド
ロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラ
ヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、ベンゾ
オキサチアン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラ
20 ジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、
ジヒドロベンゾイミダゾール、ジヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベン
ゾアゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、
ベンゾジオキセパン、ジヒドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾオ
キサゼピン、ジヒドロカルバゾール、テトラヒドロカルバゾール、ジヒドロ
25 α -カルボリン、テトラヒドロ β -カルボリン、ジヒドロアクリジン、
テトラヒドロアクリジン、ジヒドロジベンゾフラン、ジヒドロジベンゾチオ

フェン、テトラヒドロジベンゾフラン、テトラヒドロジベンゾチオフエン、
 ジオキサインダン、ベンゾジオキサン、クロマン、ベンゾジチオラン、ベン
 ゾジチアン、6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-ピリド [4', 3': 4,
 5] ピロロ [2, 3-b] ピリジン、2, 3, 4, 5-テトラヒドロ-1H
 5 -ピリド [4, 3-b] インドール、6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H
 -ピリド [3', 4': 4, 5] ピロロ [2, 3-b] ピリジン、

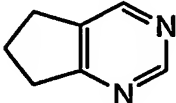
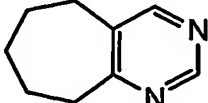
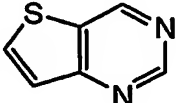


また、「3～15員飽和単環、二環または三環式複素環」としては、例えば
 アジリジン、アゼチジン、ピロリジン、イミダゾリジン、トリアゾリジン、
 10 テトラゾリジン、ピラゾリジン、ピペリジン、ピペラジン、パーヒドロピリ
 ミジン、パーヒドロピリダジン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピ
 ン、パーヒドロアゾシン、オキシラン、オキセタン、テトラヒドロフラン、
 テトラヒドロピラン、パーヒドロオキセピン、チイラン、チエタン、テトラ
 ヒドロチオフエン、テトラヒドロチオピラン、パーヒドロチエピン、テトラ
 15 ヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、テトラヒドロイソオキサゾール (イ
 ソオキサゾリジン)、テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、テトラヒド
 ロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、テトラヒドロフラザン、テトラヒド
 ロオキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、テトラヒドロオキサジン、テト
 ラヒドロオキサジアジン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジア
 20 ゼピン、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、テトラヒドロチ
 アジン、テトラヒドロチアジアジン、パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチ
 アジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、オキサチアン、パーヒドロベ
 ンゾフラン、パーヒドロイソベンゾフラン、パーヒドロベンゾチオフエン、
 パーヒドロイソベンゾチオフエン、パーヒドロインダゾール、パーヒドロキ
 25 ノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒドロナフ

チリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パーヒドロシン
ノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、
パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロカルバゾール、パーヒドロ β -
カルボリン、パーヒドロアクリジン、パーヒドロジベンゾフラン、パーヒ
5 ドロジベンゾチオフエン、ジオキサラン、ジオキサン、ジチオラン、ジチア
ン等が挙げられる。

環Bとして好ましくは、「置換基を有していてもよい含窒素複素環」が挙げ
られる。ここで「含窒素複素環」とは、少なくともひとつの窒素原子を含み、
その他に窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選ばれる1～3個のヘテロ原子
10 を含んでいてもよい単環、二環または三環式複素環を表わす。「含窒素複素
環」としては、例えば「5～15員含窒素不飽和単環、二環または三環式複
素環」、「5～15員含窒素飽和単環、二環または三環式複素環」等が挙げら
れる。「5～15員含窒素不飽和単環、二環または三環式複素環」としては例
えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、
15 ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、アゼピン、ジ
アゼピン、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、
フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、
オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、
チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、インダゾー
20 ル、キノリン、イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プテリジ
ン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサ
ゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゼピン、ベ
ンゾオキサジアゼピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、ベンゾ
アゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベ
25 ンゾトリアゾール、カルバゾール、 β -カルボリン、アクリジン、フェナジ
ン、フェノチアジン、フェノキサジン、フェナントリジン、フェナントロリ

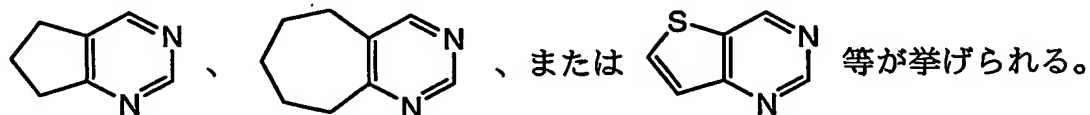
ン、ペリミジン、ピロリン、イミダゾリン、トリアゾリン、テトラゾリン、
 ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、
 テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、ジ
 ヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、テトラヒドロトリアジン、ジ
 5 ヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒド
 ロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾール、ジヒド
 ロチアゾール、ジヒドロイソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジヒドロオキ
 サジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、ジヒドロオ
 キサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テト
 10 ラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロチアジン、
 ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、ジ
 ヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、インドリン、イソイ
 ンドリン、ジヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリ
 ン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジ
 15 ン、テトラヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチ
 リジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジヒドロキナ
 ゾリン、テトラヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシン
 ノリン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラジノモ
 ルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、ジヒ
 20 ドロベンゾイミダゾール、ジヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベンゾア
 ゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、ジヒ
 ドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾオキサゼピン、ジヒドロカル
 バゾール、テトラヒドロカルバゾール、ジヒドロ β -カルボリン、テトラ
 ヒドロ β -カルボリン、ジヒドロアクリジン、テトラヒドロアクリジン、

25 、、または  等が挙げられる。

また、「5～15員含窒素飽和単環、二環または三環式複素環」としては、例えばピロリジン、イミダゾリジン、トリアゾリジン、テトラゾリジン、ピラゾリジン、ピペリジン、ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、テトラヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、テトラヒドロイソオキサゾール (イソオキサゾリジン)、テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、テトラヒドロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、テトラヒドロフラザン、テトラヒドロオキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、テトラヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジアジン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、テトラヒドロチアジン、テトラヒドロチアジアジン、パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、パーヒドロインダゾール、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パーヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロカルバゾール、パーヒドロ β -カルボリン、パーヒドロアクリジン等が挙げられる。

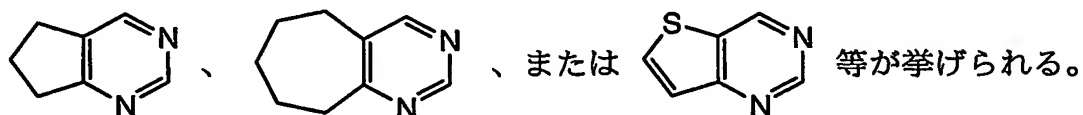
「含窒素複素環」として好ましくは、「6～11員含窒素単環、または二環式複素環」等が挙げられる。「6～11員含窒素単環、または二環式複素環」としては、例えば「6～11員不飽和単環、または二環式複素環」、「6～11員飽和単環、または二環式複素環」等が挙げられる。「6～11員不飽和単環、または二環式複素環」としては、例えばピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、アゼピン、ジアゼピン、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、インダゾール、キノリン、イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プ

- テリジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾ
 オキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゼピ
 ン、ベンゾオキサジアゼピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、
 ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾー
 5 ル、ベンゾトリアゾール、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ジヒ
 ドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロ
 ピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、テトラヒドロ
 トリアジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピ
 ン、テトラヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジ
 10 ン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジ
 アゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジン、ジヒドロチ
 アジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、ジヒドロチア
 ジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、インドリン、イソインドリン、
 ジヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、ジヒド
 15 ロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラ
 ヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、ジ
 ヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テ
 トラヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、ジ
 ヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラジノモルホリン、
 20 ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、ジヒドロベンゾ
 イミダゾール、ジヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジ
 ヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、ジヒドロベンゾ
 オキサゼピン、テトラヒドロベンゾオキサゼピン、



- 25 また、「6～11員飽和単環、または二環式複素環」としては、例えばピペ

- リジン、ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロチアジアゾール（チアジアソリジン）、テトラヒドロチアジン、テトラヒドロチアジアジン、
- 5 パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、パーヒドロインダゾール、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パーヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール等が挙げられる。環Bとしてさらに好ましくは、ピリジン、キノリン、
- 10 イソキノリン、ピリミジン、キナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、



環Bは1～5個の R^b （ R^b は R^3 と同じ意味を表わし、 R^3 は前記と同じ意味を表わす。）で置換されていてもよい。

- 15 Yで示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「炭化水素基」としては、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、s-ブチル、t-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシル、ウンデシル、ドデシル、トリデシル、テトラデシル、ペンタデシル等のC1～15アルキル基、例えばビニル、アリル、2-メチ
- 20 アルアリル、2-ブテニル、3-ブテニル、3-オクテニル等のC2～10アルケニル基、例えばエチニル、2-プロピニル、3-ヘキシニル等のC2～10アルキニル基、例えば環状炭化水素基（ここで、「環状炭化水素」は、前記環Bで定義した「環状炭化水素」と同じ意味を表わす。）、例えばベンジル、フェニルエチル等のC7～16アラルキル基、例えばシクロヘキシルメチル、
- 25 シクロヘキシルエチル、シクロヘキシルプロピル、1-メチルー1-シクロ

ヘキシルメチル等の (C 3 ~ 8 シクロアルキル) - (C 1 ~ 4 アルキル) 基等が挙げられる。

また、「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」としては、例えば (1) ニトロ、(2) 水酸基、(3) オキシ、(4) チオキシ、(5) シアノ、(6) カルバモイル、(7) N-ブチルアミノカルボニル、N-シクロヘキシルメチルアミノカルボニル、N-ブチル-N-シクロヘキシルメチルアミノカルボニル、N-シクロヘキシルアミノカルボニル、フェニルアミノカルボニル等の炭素数 1 ~ 8 の炭化水素等で置換されたアミノカルボニル、(8) カルボキシ、(9) 例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニル等の炭素数 1 ~ 4 のアルコキシーカルボニル、(10) スルホ、(11) 例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素のハロゲン、(12) 例えば、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシ、シクロヘキシルメチルオキシ、ベンジルオキシ等の炭素数 1 ~ 8 のアルコキシ、(13) 例えばシクロヘキシルオキシ等の炭素数 3 ~ 8 のシクロアルコキシ、(14) フェノキシ、(15) 例えば、o-、m-または p-クロロフェノキシ、o-、m-または p-ブロモフェノキシ等のハロゲンフェノキシ、(16) 例えば、メチルチオ、エチルチオ、n-プロピルチオ、イソプロピルチオ、n-ブチルチオ、t-ブチルチオ等の炭素数 1 ないし 4 の低級アルキルチオ、(17) フェニルチオ、(18) 例えばメチルスルフィニル、エチルスルフィニル等の炭素数 1 ~ 4 の低級アルキルスルフィニル、(19) 例えば、メチルスルホニル、エチルスルホニル等の炭素数 1 ~ 4 の低級アルキルスルホニル、(20) アミノ、(21) 例えば、アセチルアミノ、プロピオニルアミノ等の炭素数 1 ~ 6 の低級アシルアミノ、(22) 例えば、メチルアミノ、エチルアミノ、n-プロピルアミノ、イソプロピルアミノ、n-ブチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、シクロヘキシルアミノ、1-カルバモイル-2-シクロヘキシルエチルアミノ、N-ブチル-N

- ーシクロヘキシルメチルアミノ、フェニルアミノ等の炭化水素基で置換された第1または第2アミノ（ここで、「炭化水素基」は、前記の「炭化水素基」と同じ意味を表わし、オキソ、アミノ、カルバモイル等で置換されていてもよい。）、(23)例えば、ホルミル、アセチル等の炭素数1～4の低級アシル、
- 5 (24)ベンゾイル、(25)(a)例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素のハロゲン、(b)オキソ、ヒドロキシ等で置換されていてもよい、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ベンジル、シクロヘキシル、シクロヘキシルメチル、シクロヘキシルエチル等の炭化水素基（ここで、この「炭化水素基」は前記の「炭化水素基」と同じ意味を表わす。）、(c)例えばoー、mーまたはpークロロフェノキシ、oー、mーまたはpーブロモフェノキシ等のハロゲノフェノキシ、および(d)オキソ等から選ばれる1～4個の置換基を有していてもよい、例えば2ーまたは3ーチエニル、2ーまたは3ーフリル、3ー、4ーまたは5ーピラゾリル、4ーテトラヒドロピラニル、2ー、4ーまたは5ーチアゾリル、3ー、4ーまたは5ーイソチアゾリル、2ー、4ー
- 15 または5ーオキサゾリル、3ー、4ーまたは5ーイソオキサゾリル、2ー、4ーまたは5ーイミダゾリル、1，2，3ーまたは1，2，4ートリアゾリル、1Hまたは2Hーテトラゾリル、2ー、3ーまたは4ーピリジル、2ー、4ーまたは5ーピリミジル、3ーまたは4ーピリダニジル、キノリル、イソキノリル、インドリル等の炭素原子以外に酸素、硫黄、窒素等から選ばれる
- 20 ヘテロ原子を1～4個含む5または6員複素環基、(26)例えば、ジフルオロメチル、トリフルオロメチル、トリフルオロエチル、トリクロロエチル等の炭素数1～10のハロアルキル基、(27)ヒドロキシイミノ基、(28)例えば、メチルオキシイミノ、エチルオキシイミノ等のアルキルオキシイミノ基、(29)スルファモイル基、(30)例えば、メチルアミノスルホニル等の炭化水素基で置換されたアミノスルホニル、(31)例えば、ジメチルア
- 25 ミノエチルアミノスルホニル、ジメチルアミノプロピルアミノスルホニル等

のアミノ基で置換された炭化水素基によって置換されたアミノスルホニル、または(32)例えば、メチルスルホニルアミノ等の炭化水素基で置換されたスルホニルアミノ等が挙げられる。「置換基を有していてもよい炭化水素基」は、前記(1)から(32)から選ばれる1~5個の置換基を有していてもよいほか、「炭化水素基」がシクロアルキル、シクロアルケニル、アリー

5 ルまたはアラルキル基である場合は、例えばメチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル等の炭素数1~4の低級アルキルを置換基として1~4個有していてもよい。また、置換基の数が2以上の場合、それぞれの置換基は同一または異なってもよい。

10 Yで示される「置換基を有していてもよい複素環」における「複素環」は、前記環Bで定義した「複素環」と同じ意味を表わす。また、Yで示される「複素環」は1~5個の R^3 (R^3 は前記と同じ意味を表わす。)で置換されていてもよい。

Yで示される「保護されていてもよいアミノ基」におけるアミノ基の保護

15 基としては、例えば(1)置換基を有していてもよい炭化水素基、(2) NR^1R^2 (ここで R^1 、 R^2 は前記と同じ意味を表わす。)、(3) 1~5個の R^3 で置換されていてもよい環C (ここで環Cおよび R^3 は前記と同じ意味を表わす。)、(4) $\text{---G} \text{---} \bigcirc \text{---J N---W}$ (式中、すべての記号は前記と同じ意味を

表わす。)等が挙げられる。Yで示される「保護されていてもよいアミノ基」

20 における「保護基」としての「置換基を有していてもよい炭化水素基」は前記と同じ意味を表わす。

Yで示される「保護されていてもよい水酸基」または「保護されていてもよいメルカプト基」における「保護基」は、「保護されていてもよいアミノ基」における「保護基」と同じ意味を表わす。

25 Yとして好ましくは、保護されていてもよいアミノ基等が挙げられる。さ

らに好ましくは、



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。) が挙げられる。

Gで示される「主鎖の原子数 1～3 のスペーサー」とは、主鎖の原子が 1
 5 ～3 個連なっている間隔を意味する。ここで、「主鎖の原子数」は、主鎖の原子
 が最小となるように数えるものとする。「主鎖の原子数 1～3 のスペーサ
 ー」としては、例えば、1 または 2 個の置換基を有していてもよいメチレン
 基(—CH₂—)、置換基を有していてもよい窒素原子(—NH—)、—CO—、
 —O—、—S—、—SO—、—SO₂—から選ばれる 1～3 個からなる 2 価基
 10 等が挙げられる。ここで、メチレン基の置換基およびイミノ基の置換基とし
 ては、前記「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」と
 同じ意味を表わす。具体的には、例えば、—CR¹⁰⁴R¹⁰⁵—、—NR¹⁰⁶—、
 —CO—、—O—、—S—、—NR¹⁰⁶CO—、—CONR¹⁰⁶—、—NR¹
⁰⁶COCR¹⁰⁴R¹⁰⁵—、—CONR¹⁰⁶CR¹⁰⁴R¹⁰⁵— (式中、R¹⁰⁴～R
 15 ¹⁰⁶は前記「置換基を有していてもよい炭化水素基」における「置換基」と同
 じ意味を表わす。) 等が挙げられる。

Gとして好ましくは、結合手、または主鎖の原子数 1 のスペーサー等が挙
 げられる。Gとしてさらに好ましくは、結合手またはメチレン等が挙げられ
 る。

20 環 J で示される「置換基を有していてもよい 4～7 員含窒素複素環」にお
 ける「含窒素複素環」とは、一般式 (I) の環 J において表示されている窒
 素原子以外に、窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選ばれる 1～3 個のヘテ
 ロ原子を含んでいてもよい単環式複素環を表わす。「4～7 員含窒素複素環」
 としては、例えば「4～7 員含窒素不飽和単環式複素環」、「4～7 員含窒素

飽和単環式複素環」が挙げられる。

「4～7員含窒素不飽和単環式複素環」としては、例えばピロール、イミ
ダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、ピロリン、イミダゾ
リン、トリアゾリン、テトラゾリン、ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テト
5 ラヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピ
リミジン、テトラヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピ
リダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、
テトラヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾー
ル、ジヒドロチアゾール、ジヒドロイソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジ
10 ヒドロオキサジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、
ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼ
ピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロ
チアジン、ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチア
ゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン等が挙げら
15 れる。

また、「4～7員含窒素飽和単環式複素環」として、例えばアゼチジン、ピ
ロリジン、イミダゾリジン、トリアゾリジン、テトラゾリジン、ピラゾリジ
ン、ピペリジン、ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジ
ン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピン、テトラヒドロオキサゾー
20 ル(オキサゾリジン)、テトラヒドロイソオキサゾール(イソオキサゾリジン)、
テトラヒドロチアゾール(チアゾリジン)、テトラヒドロイソチアゾール(イ
ソチアゾリジン)、テトラヒドロフラザン、テトラヒドロオキサジアゾール(オ
キサジアゾリジン)、テトラヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジアジン、
パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロチア
25 ジアゾール(チアジアゾリジン)、テトラヒドロチアジン、テトラヒドロチア
ジアジン、パーヒドロチアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、

チオモルホリン等が挙げられる。

環Jとして好ましくは、4～7員含窒素飽和単環式複素環が挙げられる。
環Jとしてさらに好ましくは、アゼチジン、ピロリジン、ピペリジン、パー
ヒドロアゼピン等が挙げられる。

- 5 環Jは1～5個の R^3 (R^3 は前記と同じ意味を表わす。)で置換されていて
もよい。

Wで示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」はYで定義した「置
換基を有していてもよい炭化水素基」と同じ意味を表わす。

- Wで示される「置換基を有していてもよい複素環基」は環Bで定義した「置
10 換基を有していてもよい複素環」と同じ意味を表わす。

Wとして好ましくは水素原子または置換基を有していてもよいC 1～8炭
化水素基等が挙げられる。ここで「炭化水素基」は前記と同じ意味を表わす。

- Wとしてさらに好ましくは、水素原子、メチル、イソブチル、2-エチルブ
チル、シクロヘキシルメチル、シクロヘキシル、ベンジル、テトラヒドロピ
15 ラン-4-イル等が好ましい。

- 一般式(I-1)中の環A¹で示される「置換基を有していてもよい5～1
0員含窒素飽和複素環または1個の二重結合を含有する5～10員含窒素複
素環」とは、一般式(I-1)の環A¹において表示されている窒素原子以外
に、窒素原子、酸素原子、硫黄原子から選ばれる1～3個のヘテロ原子を含
20 んでいてもよい完全飽和または1個の二重結合を有する単環、または二環複
素環を表わす。「5～10員含窒素飽和複素環」としては、例えば、ピロリジ
ン、イミダゾリジン、トリアゾリジン、テトラゾリジン、ピラゾリジン、ピ
ペリジン、ピペラジン、パーヒドロピリミジン、パーヒドロピリダジン、パ
ーヒドロアゼピン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、テトラヒ
25 ドロオキサゾール(オキサゾリジン)、テトラヒドロイソオキサゾール(イソ
オキサゾリジン)、テトラヒドロチアゾール(チアゾリジン)、テトラヒドロ

- イソチアゾール (イソチアゾリジン)、テトラヒドロフラザン、テトラヒドロ
オキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、テトラヒドロオキサジン、テトラ
ヒドロオキサジアジン、パーヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサジアゼ
ピン、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、テトラヒドロチア
5 ジン、テトラヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチ
アゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、パー
ヒドロインダゾール、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パー
ヒドロフタラジン、パーヒドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パ
ーヒドロキナゾリン、パーヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾー
10 ル、パーヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒ
ドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、パーヒドロジアゾシン、パーヒドロジ
アゾニン、パーヒドロジアゼシン、パーヒドロインドール、パーヒドロイソ
インドール、アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン、アザビシクロ [3. 3.
2] デカン、アザビシクロ [2. 2. 2] オクタン等が挙げられる。
- 15 「1個の二重結合を含有する5～10員含窒素複素環」としては、例えば、
ピロリン、イミダゾリン、トリアゾリン、テトラゾリン、ピラゾリン、テト
ラヒドロピリジン、テトラヒドロピラジン、テトラヒドロピリミジン、テト
ラヒドロピリダジン、テトラヒドロアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、ジ
ヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾール、ジヒドロチアゾール、ジ
20 ヒドロイソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、ジ
ヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサゼピン、
テトラヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロチアジ
ン、ジヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアジ
アゼピン、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒドロアゾニン、ヘキサヒドロジ
25 アゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒドロアゼシン、オクタヒドロ
ジアゼシン等が挙げられる。

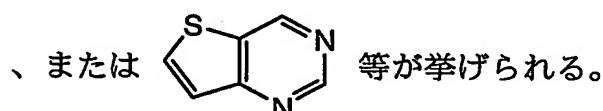
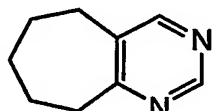
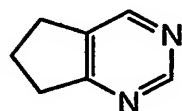
環A¹として好ましくは5～10員含窒素飽和複素環等が挙げられる。さらに好ましくは、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシン、ピペリジン、



等が挙げられる。

- 環A¹は1～5個のR^a (R^aはR³と同じ意味を表わし、R³は前記と同じ意味を表わす。) で置換されているいてもよい。

環B¹で示される「6～11員含窒素単環、または二環式複素環」とは、前記と同じ意味を表わす。環B¹として好ましくは、ピリジン、キノリン、イソキノリン、ピリミジン、キナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、



等が挙げられる。

- 10 環B¹は1～5個のR^b (R^bはR³と同じ意味を表わし、R³は前記と同じ意味を表わす。) で置換されているいてもよい。

- 本発明の一般式(I-3)中、環A²によって表わされる少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい、4～15員の単環、二環または
15 三環式複素環としては、少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の単環、二環または三環式複素環アリールまたはその一部または全部が飽和したものを表わす。

- 20 少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の単環、二環または三環式複素環アリールとしては、例えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、アゼピン、ジアゼピン、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、ベンゾイミダゾール、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、β-カルボリン、フェノチアジ

ン、フェノキサジン、ペリミジンなどが挙げられる。

少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の単環、二環または三環式複素環アリアルの一部または全部が飽和したものとして、例えば、アゼチジン、ピロリン、ピロリジン、イミダゾリン、イミダゾリジン、トリアゾリン、トリアゾリジン、テトラゾリン、テトラゾリジン、ピラゾリン、ピラゾリジン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ピペリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ピペラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、パーヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、パーヒドロピリダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、テトラヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、ジヒドロイソオキサゾール、テトラヒドロイソオキサゾール (イソオキサゾリジン)、ジヒドロチアゾール、テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、ジヒドロイソチアゾール、テトラヒドロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、ジヒドロフラザン、テトラヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、テトラヒドロオキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、ジヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサジアジン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、ジヒドロチアジン、テトラヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チ

オモルホリン、インドリン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、パー
ヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、パーヒド
ロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、パーヒド
ロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、パーヒド
5 ロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、パーヒ
ドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、パ
ーヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、パ
ーヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、パー
ヒドロシンノリン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、
10 ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾオキ
サゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、ジヒ
ドロベンゾイミダゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、ジヒドロベンゾ
アゼピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テト
ラヒドロベンゾジアゼピン、ジヒドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベ
15 ンゾオキサゼピン、ジヒドロカルバゾール、テトラヒドロカルバゾール、パ
ーヒドロカルバゾール、ジヒドロアクリジン、テトラヒドロアクリジン、パ
ーヒドロアクリジン、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒドロアゾニン、ヘキ
サヒドロジアゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒドロアゼシン、オ
クタヒドロジアゼシン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、アザウ
20 ンデカン、アザドデカン、アザトリデカン、アザテトラデカン、アザペンタ
デカン、パーヒドロジアゾシン、パーヒドロジアゾニン、パーヒドロジアゼ
シン、ジアザウンデカン、ジアザドデカン、ジアザトリデカン、ジアザテト
ラデカン、ジアザペンタデカン、パーヒドロインドール、パーヒドロイソイ
ンドール、パーヒドロ β -カルボリン、パーヒドロフェナジン、パーヒド
25 ロフェノチアジン、パーヒドロフェノキサジン、パーヒドロフェナントリジ
ン、パーヒドロフェナントロリン、パーヒドロペリミジン等が挙げられる。

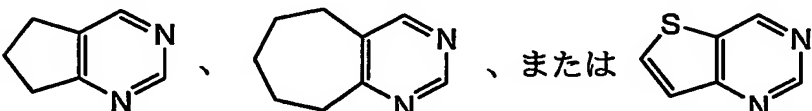
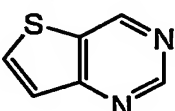
本発明の一般式 (I-3) 中、環B²によって表わされる少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の単環、二環または三環式複素環としては、少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の単環、二環または三環式複素環アリアルまたはその一部もしくは全部が飽和したものを表わす。

少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の単環、二環または三環式複素環アリアルとしては、例えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、アゼピン、ジアゼピン、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、インダゾール、キノリン、イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プテリジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゼピン、ベンゾオキサジアゼピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、β-カルボリン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、フェナントリジン、フェナントロリン、ペリミジンなどが挙げられる。

少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の

単環、二環または三環式複素環アリールのうち一部または全部が飽和したものとしては、例えば、ピロリン、ピロリジン、イミダゾリン、イミダゾリジン、トリアゾリン、トリアゾリジン、テトラゾリン、テトラゾリジン、ピラゾリン、ピラゾリジン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ピペリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ピペラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、パーヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、パーヒドロピリダジン、テトラヒドロトリアジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、パーヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、テトラヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、ジヒドロイソオキサゾール、テトラヒドロイソオキサゾール (イソオキサゾリジン)、ジヒドロチアゾール、テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、ジヒドロイソチアゾール、テトラヒドロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、ジヒドロフラザン、テトラヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、テトラヒドロオキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、ジヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサジアジン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、ジヒドロチアジン、テトラヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、インドリン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、パーヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、パーヒドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、パーヒドロイ

ソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、パーヒドロフ
 タラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、パーヒドロ
 ナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、パーヒ
 ドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、パーヒ
 5 ドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、パーヒド
 ロシンノリン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラ
 ジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾオキサゾ
 ール、ジヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾチアゾール、ジヒドロ
 ベンゾイミダゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、ジヒドロベンゾアゼ
 10 ピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒ
 ドロベンゾジアゼピン、ジヒドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾ
 オキサゼピン、ジヒドロカルバゾール、テトラヒドロカルバゾール、パーヒ
 ドロカルバゾール、ジヒドロ β -カルボリン、テトラヒドロ β -カルボ
 リン、パーヒドロ β -カルボリン、ジヒドロアクリジン、テトラヒドロア
 15 クリジン、パーヒドロアクリジン、6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-
 ピリド [4', 3' : 4, 5] ピロロ [2, 3-b] ピリジン、2, 3, 4,
 5-テトラヒドロ-1H-ピリド [4, 3-b] インドール、6, 7, 8,
 9-テトラヒドロ-5H-ピリド [3', 4' : 4, 5] ピロロ [2, 3-b]
 ピリジン、

20 
 、または 
 などが挙げられる。

本発明の一般式 (I-A) 中、環A^Aによって表わされる少なくとも1個の
 窒素原子を含有し、さらに1~3個の窒素原子、1~2個の酸素原子および
 /または1個の硫黄原子を含有してもよい、4~15員の飽和または1個の
 二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環としては、例えば、アゼ
 25 チジン、ピロリン、ピロリジン、イミダゾリン、イミダゾリジン、トリアゾ

リン、トリアゾリジン、テトラゾリン、テトラゾリジン、ピラゾリン、ピラ
ゾリジン、テトラヒドロピリジン、ピペリジン、テトラヒドロピラジン、ピ
ペラジン、テトラヒドロピリミジン、パーヒドロピリミジン、テトラヒドロ
5 ピリダジン、パーヒドロピリダジン、テトラヒドロアゼピン、パーヒドロア
ゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、パーヒドロジアゼ
ピン、ジヒドロオキサゾール、テトラヒドロオキサゾール(オキサゾリジン)、
ジヒドロイソオキサゾール、テトラヒドロイソオキサゾール(イソオキサゾ
リジン)、ジヒドロチアゾール、テトラヒドロチアゾール(チアゾリジン)、
ジヒドロイソチアゾール、テトラヒドロイソチアゾール(イソチアゾリジン)、
10 ジヒドロフラザン、テトラヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、テ
トラヒドロオキサジアゾール(オキサジアゾリジン)、ジヒドロオキサジン、
テトラヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサジ
アジン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサゼピン、テトラヒド
ロオキサジアゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾー
15 ル、テトラヒドロチアジアゾール(チアジアゾリジン)、ジヒドロチアジン、
テトラヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアジアジン、
テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアジアゼ
ピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、パーヒド
ロインダゾール、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒド
20 ロフタラジン、パーヒドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒ
ドロキナゾリン、パーヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、
パーヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロ
カルバゾール、パーヒドロアクリジン、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒド
ロアゾニン、ヘキサヒドロジアゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒ
25 ドロアゼシン、オクタヒドロジアゼシン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロ
アゼシン、アザウンデカン、アザドデカン、アザトリデカン、アザテトラデ

カン、アザペンタデカン、パーヒドロジアゾシン、パーヒドロジアゾニン、
パーヒドロジアゼシン、ジアザウンデカン、ジアザドデカン、ジアザトリデ
カン、ジアザテトラデカン、ジアザペンタデカン、パーヒドロインドール、
パーヒドロイソインドール、パーヒドロ β -カルボリン、パーヒドロフェ
5 ナジン、パーヒドロフェノチアジン、パーヒドロフェノキサジン、パーヒド
ロフェナントリジン、パーヒドロフェナントロリン、パーヒドロペリミジン
等が挙げられる。

本発明の一般式 (I-B) 中、環A^Bによって表わされる少なくとも1個の
窒素原子を含有し、さらに1~3個の窒素原子、1~2個の酸素原子および
10 /または1個の硫黄原子を含有してもよい、7~15員の飽和または1個の
二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環としては、例えば、テト
ラヒドロアゼピン、パーヒドロアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒ
ドロジアゼピン、パーヒドロアゾシン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒ
ドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、パーヒドロオキサジア
15 ゼピン、テトラヒドロチアゼピン、パーヒドロチアゼピン、テトラヒドロチ
アジアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、パーヒドロインダゾール、パー
ヒドロキノリン、パーヒドロイソキノリン、パーヒドロフタラジン、パーヒ
ドロナフチリジン、パーヒドロキノキサリン、パーヒドロキナゾリン、パー
ヒドロシンノリン、パーヒドロベンゾオキサゾール、パーヒドロベンゾチア
20 ゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロカルバゾール、パーヒ
ドロアクリジン、ヘキサヒドロアゾシン、ヘキサヒドロアゾニン、ヘキサヒ
ドロジアゾシン、ヘキサヒドロジアゾニン、オクタヒドロアゼシン、オクタ
ヒドロジアゼシン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、アザウンデ
カン、アザドデカン、アザトリデカン、アザテトラデカン、アザペンタデカ
25 ン、パーヒドロジアゾシン、パーヒドロジアゾニン、パーヒドロジアゼシン、
ジアザウンデカン、ジアザドデカン、ジアザトリデカン、ジアザテトラデカ

ン、ジアザペンタデカン、パーヒドロインドール、パーヒドロイソインドール、パーヒドロ β -カルボリン、パーヒドロフェナジン、パーヒドロフェノチアジン、パーヒドロフェノキサジン、パーヒドロフェナントリジン、パーヒドロフェナントロリン、パーヒドロペリミジン等が挙げられる。

- 5 なお上記の一般式 (I-3) 中の A^2 、一般式 (I-A) 中の A^A 、一般式 (I-B) 中の A^B によって表わされる二環式複素環には、架橋した二環式複素環も含まれる。架橋した二環式複素環としては、例えば、アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン、アザビシクロ [3. 3. 2] デカン、アザビシクロ [2. 2. 2] オクタン、アザビシクロ [3. 3. 3] ウンデカン、アザビシクロ
- 10 [4. 3. 3] ドデカン、アザビシクロ [4. 4. 3] トリデカン、アザビシクロ [4. 4. 4] テトラデカンなどが挙げられる。架橋した二環式複素環は、1 個の二重結合を有してもよい。

本発明中、一般式 (I-B) 中、環 B^B は、環 Z と縮合してもよいピリミジン環または 1, 3, 5-トリアジン環である。

- 15 本発明中、環 Z によって表わされる C 5 ~ 10 単環もしくは二環式炭素環としては、例えば、シクロペンテン、シクロヘキセン、シクロヘプテン、シクロオクテン、シクロノネン、シクロデセン、シクロペンタジエン、シクロヘキサジエン、シクロヘプタジエン、シクロオクタジエン、ベンゼン、ペンタレン、アズレン、インデン、インダン、ナフタレン、ジヒドロナフタレン、
- 20 テトラヒドロナフタレンなどが挙げられる。

- 本発明の環 Z によって表わされる 1 ~ 2 個の窒素原子、1 個の酸素原子および/または 1 個の硫黄原子を含有してもよい 5 ~ 10 員の単環または二環式複素環とは、1 ~ 2 個の窒素原子、1 個の酸素原子および/または 1 個の硫黄原子を含有してもよい 5 ~ 10 員の単環または二環式複素環アリアルまたはその一部が飽和されたものを表わす。
- 25

1 ~ 2 個の窒素原子、1 個の酸素原子および/または 1 個の硫黄原子を含有

有してもよい5～10員の単環または二環式複素環アリールとは、例えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、アゼピン、ジアゼピン、フラン、ピラン、オキセピン、チオフェン、チオピラン、チエピン、オキサゾール、イソオキサゾール、
5 チアゾール、イソチアゾール、フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジチアナフタレン、インダゾール、キノリン、
10 イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プテリジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、クロメン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベンゾトリアゾール環などが挙げられる。

1～2個の窒素原子、1個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含む有してもよい5～10員の単環または二環式複素環アリールの一部が飽和されたものとは、例えば、ピロリン、イミダゾリン、ピラゾリン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、ジヒドロ
20 ジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、ジヒドロフラン、ジヒドロピラン、ジヒドロオキセピン、テトラヒドロオキセピン、ジヒドロチオフェン、ジヒドロチオピラン、ジヒドロチエピン、テトラヒドロチエピン、ジヒドロオキサゾール、ジヒドロイソオキサゾール、ジヒドロチアゾール、ジヒドロイソチアゾール、ジヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、ジヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、ジヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオ
25 キサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、

ジヒドロチアジアゾール、ジヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、ジヒドロオキサジン、ジヒドロチアジン、オキサチアン、インドリン、イソインドリン、ジヒドロベンゾフラン、ジヒドロイソベンゾフラン、ジヒドロベンゾチオフェン、ジヒドロイソベンゾチオフェン、ジヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、ベンゾオキサチアン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、ジヒドロベンゾイミダゾール、ジオキサインダン、ベンゾジオキサン、クロマン、ベンゾジチオラン、ベンゾジチアンなどが挙げられる。

15 本発明中、Lによって表わされるC1～8アルキレンとは、メチレン、エチレン、プロピレン、ブチレン、ペンチレン、ヘキシレン、ヘプチレン、オクチレンまたはその異性体を表わす。

本発明中、Lによって表わされるC2～8アルケニレンとは、エチレン、プロピレン、ブチレン、ペンチレン、ヘキシレン、ヘプチレン、オクチレン
20 またはその異性体のうち1～2個の二重結合を有するものを表わす。例えば、エテン、プロペニレン、ブテニレン、ペンテニレン、ヘキセニレン、ヘプテニレン、オクテニレン、ヘキサジエニレン、ヘプタジエニレン、オクタジエニレンまたはその異性体が挙げられる。

本発明中、Lによって表わされるC2～8アルキニレンとは、エチレン、
25 プロピレン、ブチレン、ペンチレン、ヘキシレン、ヘプチレン、オクチレンまたはその異性体のうち1個の三重結合を有するものを表わす。例えば、エ

チン、プロピニレン、ブチニレン、ペンチニレン、ヘキシニレン、ヘプチニレン、オクチニレンまたはその異性体が挙げられる。

本発明中、L、R¹、R²およびR⁴によって表わされるC₃～8炭素環とは、C₃～8単環式または架橋した二環式炭素環を表わし、例えば、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、シクロオクタン、シクロペンテン、シクロヘキセン、シクロヘプテン、シクロオクテン、シクロペンタジエン、シクロヘキサジエン、シクロヘプタジエン、シクロオクタジエン、ベンゼン、ビスクロ[2.2.1]ヘプタン、ビスクロ[2.2.2]オクタンなどを表わす。

10 本発明中、C₁～15アルキルとは、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシル、ウンデシル、ドデシル、トリデシル、テトラデシル、ペンタデシルまたはその異性体を表わす。

15 本発明中、C₂～15アルケニルとは、エテニル、プロペニル、ブテニル、ペンテニル、ヘキセニル、ヘプテニル、オクテニル、ノネニル、デセニル、ウンデセニル、ドデセニル、トリデセニル、テトラデセニル、ペンタデセニルまたはその異性体を表わす。

20 本発明中、C₂～15アルキニルとは、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペンチニル、ヘキシニル、ヘプチニル、オクチニル、ノニニル、デシニル、ウンデシニル、ドデシニル、トリデシニル、テトラデシニル、ペンタデシニルまたはその異性体を表わす。

25 本発明中、環Cによって表わされる少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の複素環とは、少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の複素環アリールまたはその一

部または全部が飽和したものを表わす。

少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の複素環アリールとは、例えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、アゼピン、ジアゼピン、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、インドール、イソインドール、インドリジン、インダゾール、キノリン、イソキノリン、キノリジン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゼピン、ベンゾオキサジアゼピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、 β -カルボリン、アクリジン、フェナジン、キサンテン、フェノチアジン、フェノキサジン、フェノキサチイン、フェナントリジン、フェナントロリン、ペリミジンなどを表わす。

少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい4～15員の複素環アリールの一部または全部が飽和したものとしては、例えば、アゼチジン、ピロリン、ピロリジン、イミダゾリン、イミダゾリジン、トリアゾリン、トリアゾリジン、テトラゾリン、テトラゾリジン、ピラゾリン、ピラゾリジン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ピペリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ピペラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、パーヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、パーヒドロピリダジン、ジヒドロアゼピン、テトラヒド

ロアゼピン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒドロジアゼピン、ジヒドロオキサゾール、テトラヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、ジヒドロイソオキサゾール、テトラヒドロイソオキサゾール (イソオキサゾリジン)、ジヒドロチアゾール、
5 テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、ジヒドロイソチアゾール、テトラヒドロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、ジヒドロフラザン、テトラヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、テトラヒドロオキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、ジヒドロオキサジン、テトラヒドロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサジアジン、ジヒドロオキサゼ
10 ピン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサゼピン、ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、パーヒドロオキサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、テトラヒドロチアジアゾール (チアジアゾリジン)、ジヒドロチアジン、テトラヒドロチアジン、ジヒドロチアジアジン、テトラヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロチアゼピン、
15 パーヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒドロチアジアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリン、オキサチアン、インドリン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、パーヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、パーヒドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、パーヒドロイソキノ
20 リン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、パーヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、パーヒドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、パーヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、パーヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、パーヒドロシ
25 ンノリン、ベンゾオキサチアン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジヒドロベンゾチアジン、ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、パーヒド

ロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベンゾチア
 ゾール、ジヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロベンゾイミダゾール、ジ
 ヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジヒドロベンゾジア
 ゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、ベンゾジオキセパン、ジヒドロベ
 5 ンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾオキサゼピン、ジヒドロカルバゾー
 ル、テトラヒドロカルバゾール、パーヒドロカルバゾール、ジヒドロアクリ
 ジン、テトラヒドロアクリジン、パーヒドロアクリジン、ヘキサヒドロアゾ
 シン、ヘキサヒドロアゾニン、ヘキサヒドロジアゾシン、ヘキサヒドロジア
 ゾニン、オクタヒドロアゼシン、オクタヒドロジアゼシン、パーヒドロアゾ
 10 ニン、パーヒドロアゼシン、アザウンデカン、アザドデカン、アザトリデカ
 ン、アザテトラデカン、アザペンタデカン、パーヒドロジアゾシン、パーヒ
 ドロジアゾニン、パーヒドロジアゼシン、ジアザウンデカン、ジアザドデカ
 ン、ジアザトリデカン、ジアザテトラデカン、ジアザペンタデカン、パーヒ
 ドロインドール、パーヒドロイソインドール、パーヒドロ β -カルボリン、
 15 パーヒドロフェナジン、パーヒドロフェノチアジン、パーヒドロフェノキサ
 ジン、パーヒドロフェナントリジン、パーヒドロフェナントロリン、パーヒ
 ドロペリミジン環などが挙げられる。

本発明中、環Dおよび環Eによって表わされる1～4個の窒素原子、1～
 2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の単環、
 20 二環もしくは三環式複素環とは、1～4個の窒素原子、1～2個の酸素原子
 および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の単環、二環もしくは
 三環式複素環アリールまたはその一部または全部が飽和したものを表わす。

1～4個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を
 含有する5～15員の単環、二環もしくは三環式複素環アリールとしては例
 25 えば、ピロール、イミダゾール、トリアゾール、テトラゾール、ピラゾール、
 ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、アゼピン、ジアゼピン、フ

ラン、ピラン、オキセピン、チオフェン、チオピラン、チエピン、オキサゾール、イソオキサゾール、チアゾール、イソチアゾール、フラザン、オキサジアゾール、オキサジン、オキサジアジン、オキサゼピン、オキサジアゼピン、チアジアゾール、チアジン、チアジアジン、チアゼピン、チアジアゼピン、

5 ン、インドール、イソインドール、インドリジン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジチアナフタレン、インダゾール、キノリン、イソキノリン、キノリジン、プリン、フタラジン、プテリジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、クロメン、ベン

10 ゾオキセピン、ベンゾオキサゼピン、ベンゾオキサジアゼピン、ベンゾチエピン、ベンゾチアゼピン、ベンゾチアジアゼピン、ベンゾアゼピン、ベンゾジアゼピン、ベンゾフラザン、ベンゾチアジアゾール、ベンゾトリアゾール、カルバゾール、 β -カルボリン、アクリジン、フェナジン、ジベンゾフラン、キサンテン、ジベンゾチオフェン、フェノチアジン、フェノキサジン、フェ

15 ノキサチン、チアンスレン、フェナントリジン、フェナントロリン、ペリミジンなどを表わす。

1～4個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の単環、二環もしくは三環式複素環アリアル的一部または全部が飽和したものとしては例えば、ピロリン、ピロリジン、イミダゾ

20 リン、イミダゾリジン、トリアゾリン、トリアゾリジン、テトラゾリン、テトラゾリジン、ピラゾリン、ピラゾリジン、ジヒドロピリジン、テトラヒドロピリジン、ピペリジン、ジヒドロピラジン、テトラヒドロピラジン、ピペラジン、ジヒドロピリミジン、テトラヒドロピリミジン、パーヒドロピリミジン、ジヒドロピリダジン、テトラヒドロピリダジン、パーヒドロピリダジ

25 ン、ジヒドロアゼピン、テトラヒドロアゼピン、パーヒドロアゼピン、ジヒドロジアゼピン、テトラヒドロジアゼピン、パーヒドロジアゼピン、ジヒド

ロオキサゾール、テトラヒドロオキサゾール (オキサゾリジン)、ジヒドロイ
ソオキサゾール、テトラヒドロイソオキサゾール (イソオキサゾリジン)、ジ
ヒドロチアゾール、テトラヒドロチアゾール (チアゾリジン)、ジヒドロイソ
チアゾール、テトラヒドロイソチアゾール (イソチアゾリジン)、ジヒドロフ
5 ラザン、テトラヒドロフラザン、ジヒドロオキサジアゾール、テトラヒドロ
オキサジアゾール (オキサジアゾリジン)、ジヒドロオキサジン、テトラヒド
ロオキサジン、ジヒドロオキサジアジン、テトラヒドロオキサジアジン、ジ
ヒドロオキサゼピン、テトラヒドロオキサゼピン、パーヒドロオキサゼピン、
ジヒドロオキサジアゼピン、テトラヒドロオキサジアゼピン、パーヒドロオ
10 キサジアゼピン、ジヒドロチアジアゾール、テトラヒドロチアジアゾール (チ
アジアゾリジン)、ジヒドロチアジン、テトラヒドロチアジン、ジヒドロチア
ジアジン、テトラヒドロチアジアジン、ジヒドロチアゼピン、テトラヒドロ
チアゼピン、パーヒドロチアゼピン、ジヒドロチアジアゼピン、テトラヒド
ロチアジアゼピン、パーヒドロチアジアゼピン、モルホリン、チオモルホリ
15 ン、オキサチアン、インドリン、イソインドリン、ジヒドロインダゾール、
パーヒドロインダゾール、ジヒドロキノリン、テトラヒドロキノリン、パー
ヒドロキノリン、ジヒドロイソキノリン、テトラヒドロイソキノリン、パー
ヒドロイソキノリン、ジヒドロフタラジン、テトラヒドロフタラジン、パー
ヒドロフタラジン、ジヒドロナフチリジン、テトラヒドロナフチリジン、パ
20 ーヒドロナフチリジン、ジヒドロキノキサリン、テトラヒドロキノキサリン、
パーヒドロキノキサリン、ジヒドロキナゾリン、テトラヒドロキナゾリン、
パーヒドロキナゾリン、ジヒドロシンノリン、テトラヒドロシンノリン、パ
ーヒドロシンノリン、ベンゾオキサチアン、ジヒドロベンゾオキサジン、ジ
ヒドロベンゾチアジン、ピラジノモルホリン、ジヒドロベンゾオキサゾール、
25 パーヒドロベンゾオキサゾール、ジヒドロベンゾチアゾール、パーヒドロベ
ンゾチアゾール、ジヒドロベンゾイミダゾール、パーヒドロベンゾイミダゾ

ール、ジヒドロベンゾアゼピン、テトラヒドロベンゾアゼピン、ジヒドロベンゾジアゼピン、テトラヒドロベンゾジアゼピン、ベンゾジオキセパン、ジヒドロベンゾオキサゼピン、テトラヒドロベンゾオキサゼピン、ジヒドロカルバゾール、テトラヒドロカルバゾール、パーヒドロカルバゾール、ジヒドロ
5 ロアクリジン、テトラヒドロアクリジン、パーヒドロアクリジン環などが挙げられる。

本発明中、環Dおよび環Eによって表わされるC 3～15単環、二環もしくは三環式炭素環には、C 3～15の単環、二環または三環式炭素環アリール、その一部または全部が飽和された炭素環、スピロ結合した二環式炭素環
10 および架橋した二環式炭素環が含まれる。例えば、シクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、シクロオクタン、シクロノナン、シクロデカン、シクロウンデカン、シクロドデカン、シクロトリドデカン、シクロテトラデカン、シクロペンタデカン、シクロペン
15 テン、シクロヘキセン、シクロヘプテン、シクロオクテン、シクロペンタジエン、シクロヘキサジエン、シクロヘプタジエン、シクロオクタジエン、ベンゼン、ペンタレン、パーヒドロペンタレン、アズレン、パーヒドロアズレン、インデン、パーヒドロインデン、インダン、ナフタレン、ジヒドロナフ
20 タレン、テトラヒドロナフタレン、パーヒドロナフタレン、ヘプタレン、パーヒドロヘプタレン、ビフェニレン、a s-インダセン、s-インダセン、アセナフチレン、アセナフテン、フルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、スピロ[4.4]ノナン、スピロ[4.5]デカン、スピロ
[5.5]ウンデカン、ビシクロ[2.2.1]ヘプタン、ビシクロ[2.2.1]ヘプター2-エン、ビシクロ[3.1.1]ヘプタン、ビシクロ[3.1.1]ヘプター2-エン、ビシクロ[2.2.2]オクタン、ビシクロ[2.
25 2.2]オクター2-エン、アダマンタン、ノルアダマンタン環などが挙げられる。

本発明中、環Eの置換基であるC₁～C₁₅アルコキシとは、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、ウンデシルオキシ、ドデシルオキシ、トリデシルオキシ、テトラデシルオキシ、ペンタデシルオキシおよびその異性体が挙げられる。

本発明中、環Eの置換基であるモノ（C₁～C₈アルキル）アミノ基とは、メチルアミノ、エチルアミノ、プロピルアミノ、ブチルアミノ、ペンチルアミノ、ヘキシルアミノ、ヘプチルアミノ、オクチルアミノおよびその異性体が挙げられる。

10 本発明中、環Eの置換基であるジ（C₁～C₈アルキル）アミノ基とは、同一または異なる2個のC₁～C₈アルキルによって置換されたアミノ基を表わし、例えば、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジプロピルアミノ、ジブチルアミノ、ジペンチルアミノ、ジヘキシルアミノ、ジヘプチルアミノ、ジオクチルアミノ、エチルメチルアミノ、エチルプロピルアミノ、メチルプロピルアミノ、およびその異性体などが挙げられる。

R¹⁰¹およびR¹⁰²で示される「置換基を有していてもよい炭化水素基」はYで定義した「置換基を有していてもよい炭化水素基」と同じ意味を表わす。





本発明中、ハロゲン原子とは、フッ素、塩素、臭素およびヨウ素を表わす。

本発明中、CXCR₄調節剤には、当然のことではあるが、アゴニスト（作動薬）およびアンタゴニスト（拮抗薬）が含まれる。アゴニストにはフルアゴニスト、パーシャルアゴニスト、インバースアゴニストが含まれ、アンタゴニストには、フルアンタゴニスト、パーシャルアンタゴニストが含まれる。

また、本発明中、CXCR₄調節剤としては、単独でまたはCXCR₄のリガンド（例えば、SDF-1、gp120など）もしくはHIVと協奏してCXCR₄に親和性を有する化合物なら何でもよく、それがアゴニスト、アンタゴニストいずれの作用を有してもよい。

すなわち、本明細書中でCXCR4調節剤とは、CXCR4と内因性リガンド（例えば、SDF-1等）やHIVの結合を阻害することができる化合物であれば何でもよい。したがって、作動薬でも拮抗薬でもよく、好ましくは拮抗薬である。

- 5 本発明においては、特に指示しない限り異性体はこれをすべて包含する。例えば、アルキル、アルコキシおよびアルキレン基には直鎖のものおよび分枝鎖のものが含まれる。さらに、二重結合、環、縮合環における異性体（E、Z、シス、トランス体）、不斉炭素の存在などによる異性体（R、S体、 α 、 β 体、エナンチオマー、ジアステレオマー）、旋光性を有する光学活性体（D、L、d、l体）、クロマトグラフ分離による極性体（高極性体、低極性体）、平衡化合物、回転異性体、これらの任意の割合の混合物、ラセミ混合物は、
- 10 すべて本発明に含まれる。

- 本発明においては、特に断わらない限り、当業者にとって明らかなように記号  は紙面の向こう側（すなわち α -配置）に結合していることを表わし、 は紙面の手前側（すなわち β -配置）に結合していることを表わし、 は α -、 β -またはそれらの混合物であることを表わし、 は、 α -配置と β -配置の混合物であることを表わす。
- 15

本発明化合物は、公知の方法で塩に変換される。

塩は、水溶性のものが好ましい。

- 20 本発明化合物の塩としては、例えば、アルカリ金属（カリウム、ナトリウム、リチウムなど）の塩、アルカリ土類金属（カルシウム、マグネシウムなど）の塩、アンモニウム塩（テトラメチルアンモニウム塩、テトラブチルアンモニウム塩など）、有機アミン（トリエチルアミン、メチルアミン、ジメチルアミン、シクロペンチルアミン、ベンジルアミン、フェネチルアミン、ピペリジン、モノエタノールアミン、ジエタノールアミン、トリス（ヒドロキシメチル）メチルアミン、リジン、アルギニン、N-メチル-D-グルカミ
- 25

ンなど)の塩、酸付加物塩(無機酸塩(塩酸塩、臭化水素酸塩、ヨウ化水素酸塩、硫酸塩、リン酸塩、硝酸塩など)、有機酸塩(酢酸塩、トリフルオロ酢酸塩、乳酸塩、酒石酸塩、シュウ酸塩、フマル酸塩、マレイン酸塩、安息香酸塩、クエン酸塩、メタンスルホン酸塩、エタンスルホン酸塩、ベンゼンスルホン酸塩、トルエンスルホン酸塩、イセチオン酸塩、グルクロン酸塩、グルコン酸塩など)など)が挙げられる。

また、N-オキシド体とは、一般式(I)で示される化合物の窒素原子が、酸化されたものを表わす。本発明化合物は任意の方法でN-オキシド体になることができる。本発明化合物の塩およびN-オキシド体には、溶媒和物、
10 または上記本発明化合物のアルカリ(土類)金属塩、アンモニウム塩、有機アミン塩、酸付加物塩の溶媒和物も含まれる。

溶媒和物是非毒性かつ水溶性であることが好ましい。適当な溶媒和物としては、例えば水、アルコール系溶媒(エタノールなど)などの溶媒和物が挙げられる。

15 また、一般式(I)で示される化合物のプロドラッグとは、生体内において酵素や胃酸等による反応により一般式(I)で示される化合物に変換される化合物をいう。一般式(I)で示される化合物のプロドラッグとしては、一般式(I)で示される化合物がアミノ基を有する場合、該アミノ基がアシル化、アルキル化、リン酸化された化合物(例えば、一般式(I)で示される化合物のアミノ基がエイコサノイル化、アラニル化、ペンチルアミノカルボニル化、(5-メチルー2-オキソー-1,3-ジオキサレン-4-イル)メトキシカルボニル化、テトラヒドロフラニル化、ピロリジルメチル化、ピバロイルオキシメチル化、アセトキシメチル化、tert-ブチル化された化合物など);一般式(I)で示される化合物が水酸基を有する場合、該水酸基がアシル化、アルキル化、リン酸化、ホウ酸化された化合物(例えば、一般式(I)
25 で示される化合物の水酸基がアセチル化、パルミトイル化、プロパノイル化、

ビバロイル化、サクシニル化、フマリル化、アラニル化、ジメチルアミノメ
 チルカルボニル化された化合物など)；一般式 (I) で示される化合物がカル
 ボキシ基を有する場合該カルボキシ基がエステル化、アミド化された化合物
 (例えば、一般式 (I) で示される化合物のカルボキシ基がエチルエステル
 5 化、フェニルエステル化、カルボキシメチルエステル化、ジメチルアミノメ
 チルエステル化、ビバロイルオキシメチルエステル化、エトキシカルボニル
 オキシエチルエステル化、フタリジルエステル化、(5-メチル-2-オキソ
 -1, 3-ジオキソレン-4-イル) メチルエステル化、シクロヘキシルオ
 キシカルボニルエチルエステル化、メチルアミド化された化合物など) 等が
 10 挙げられる。これらの化合物は自体公知の方法によって製造することができる。また、一般式 (I) で示される化合物のプロドラッグは水和物および非
 水和物のいずれであってもよい。

一般式 (I-3) で示される本発明化合物のうち、環A²としては、少なく
 とも1個の窒素原子を含有し、さらに1~3個の窒素原子、1~2個の酸素
 15 原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい4~15員の単環、二
 環または三環式複素環であればいずれも好ましい。より好ましくは5~10
 員の単環または二環式複素環等である。具体的にはピロリジン、ピペリジン、
 モルホリン、テトラヒドロピリジン、パーヒドロキノリン、パーヒドロイソ
 キノリン、パーヒドロジアゼピン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシ
 20 ン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン、2-アザビシクロ[3.2.
 2]ノナン、3-アザビシクロ[3.2.2]ノナン、1-アザビシクロ[2.
 2.2]オクタンおよび2-アザビシクロ[2.2.2]オクタン等が好ま
 しく、最も好ましくは、ピペリジンおよびパーヒドロアゼピン等である。

本発明中、R^aはいずれも好ましいが、より好ましくは、環Dによって置換
 25 されてもよいC1~4アルキル、OR¹¹、OCOR¹²、NR¹⁴R¹⁵、NR¹
⁶COR¹²、NR¹⁶CONR¹⁴R¹⁵、COOR¹³、COR¹²、CONR¹⁴

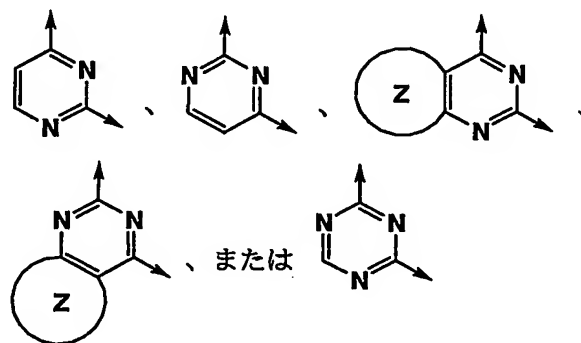
R^{15} および環D等である。より好ましくは、C 1～4アルキル、フェニル、ベンジル、アセチル、ベンジルオキシカルボニル、ヒドロキシ、エトキシカルボニル、カルバモイル、ピペリジニルおよびシクロヘキシル等である。

一般式 (I-3) で示される本発明化合物のうち、環 B^2 としては、少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～15員の単環、二環または三環式複素環であればいずれも好ましい。より好ましくは、環Zと縮合してもよい6員の1～3個の窒素原子を含有する複素環等である。

上記した6員の複素環としては、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、ピペリジン、ピペラジン、テトラヒドロピリジン、テトラヒドロピラジン、テトラヒドロピリミジン、テトラヒドロトリアジンなどが好ましい。

本発明中、環Zとして好ましくは、C 5～7の単環式炭素環または5～7員の単環式複素環等である。

本発明中、環 B^2 としては、環 B^{A1} および環 B^{A2} も好ましい。また、



15

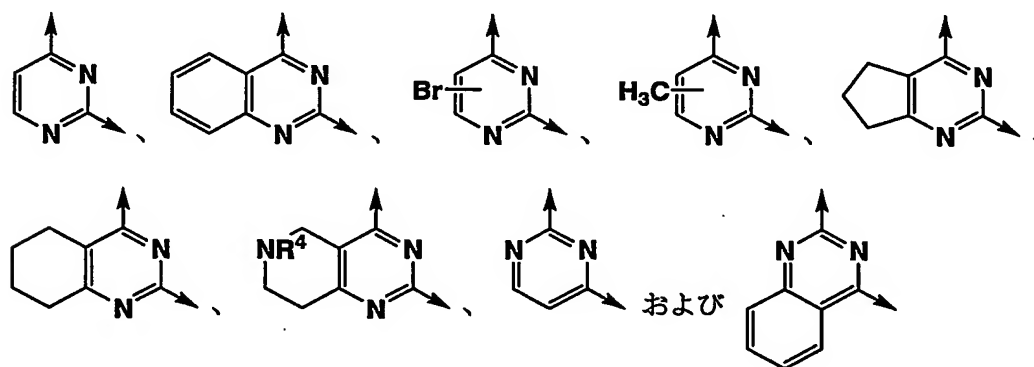
(基中、上向きの矢印は環 A^2 との結合部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わす。) 等も好ましい。

本発明中、 R^b としてはいずれも好ましいが、より好ましくは、環Dによって置換されてもよいC 1～4アルキル、 OR^{11} 、 $OCOR^{12}$ 、 $NR^{14}R^{15}$ 、 $NR^{16}COR^{12}$ 、 $NR^{16}CONR^{14}R^{15}$ 、 $COOR^{13}$ 、 COR^{12} 、 $CONR^{14}R^{15}$ および環D等である。より好ましくは、C 1～4アルキル、フェニ

ル、ペンジル、アセチル、ベンジルオキシカルボニル、ヒドロキシ、エトキシカルボニル、カルバモイル、ピペリジニルおよびシクロヘキシル等である。

本発明中、一般式 (I-A) で示される化合物のうち、環 A^A としては少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、4～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環はいずれも好ましいが、特に少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、5～10員の飽和または1個の二重結合を含有する単環または二環式の複素環が好ましい。

本発明中、一般式 (I-A) で示される化合物のうち、環 B^A としては環 B^{A_1} および環 B^{A_2} に挙げられた環はいずれも好ましい。より好ましくは、



(基中、上向きの矢印は環 A^A との結合部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わす。) 等である。

本発明中、一般式 (I-B) で示される化合物のうち、環 A^B としては少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、7～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環はいずれも

好ましいが、特に少なくとも 1 個の窒素原子を含有し、さらに 1～3 個の窒素原子、1～2 個の酸素原子および／または 1 個の硫黄原子を含有してもよい、7～10 員の飽和または 1 個の二重結合を含有する単環または二環式複素環等が好ましい。

- 5 本発明中、一般式 (I-B) で示される化合物のうち、環 B^Bとしてはいずれも好ましいが、より好ましくは環 Z と縮合してもよいピリミジン等である。環 Z として好ましくは、C 5～7 単環式炭素環または 5～7 員の単環式複素環等である。

- 本発明中、L としてはいずれも好ましい。より好ましくは結合手、C 1～
10 6 アルキレンおよび C 3～8 炭素環等である。さらに好ましくは結合手、C 1～4 アルキレンおよび C 3～7 炭素環等である。

本発明中、Q としては NR¹R² および環 C のいずれも好ましい。

- 本発明中、Q を表わす NR¹R² のうち、R¹ および R² として好ましくは、
15 水素原子、R¹⁰ によって置換された C 1～12 アルキル、C 2～12 アルケニル、環 D によって置換された C 1～12 アルキルおよび C 2～12 アルケニル等である。より好ましくは、水素原子、メチル、エチル、プロピル、イソブチル、ブチル、メチルチオプロピル等である。

- 本発明中、Q を表わす環 C として好ましくは、アゼチジン、ピロリジン、
20 ピペリジン、モルホリン、ピペラジン、チオモルホリン、パーヒドロアゼピン、パーヒドロアゾシン、パーヒドロアゾニン、パーヒドロアゼシン等である。

- 本発明中、環 D として好ましくは、C 3～10 炭素環および 5～15 員の複素環等である。より好ましくは、ベンゼン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ピラゾール、ベンゾジオキソール、テトラヒドロベンゼン、フラン、
25 チアゾール、ナフタレン、チオフェン、シクロプロパン、キノリン、ピリジン、シクロヘキサン等である。

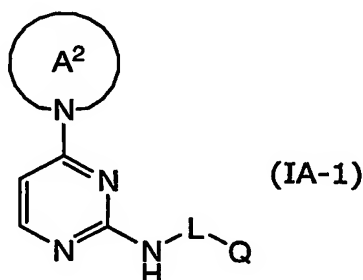
本発明中、 R^3 として好ましくは、 $C1\sim10$ アルキル、 $C2\sim10$ アルケニル、 $C2\sim10$ アルキニル、 R^{10} によって置換された $C1\sim10$ アルキル、 $COOR^{12}$ 、 OR^{11} 、 $NR^{14}R^{15}$ 、 COR^{12} 、 $CONR^{14}R^{15}$ 、環Eである。

- 5 本発明中、 R^3 中の R^{10} として好ましくは、 $COOR^{12}$ 、 OR^{11} 、 $NR^{14}R^{15}$ 、 COR^{12} 、 $CONR^{14}R^{15}$ 、環Eである。

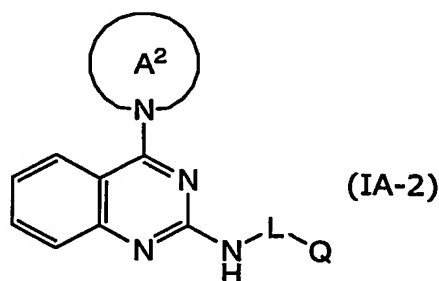
本発明中、 R^4 としてはいずれも好ましい。より好ましくは水素原子、 $C1\sim8$ アルキル、フェニル、 COR^5 、 $COOR^6$ である。

- 一般式(I)で示される化合物のうち、好ましい化合物としては、一般式
10 (I-1)、(I-2)、(I-3)、(I-A) および (I-B) で示される化合物等が挙げられる。

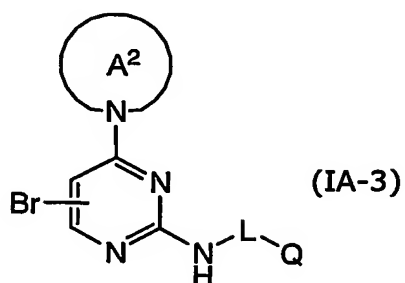
一般式(I-3)で示される化合物のうち、好ましい化合物としては、
一般式(IA-1)



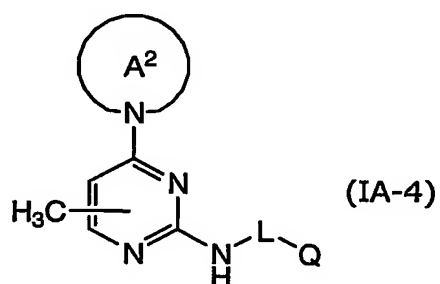
- 15 (式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式(IA-2)



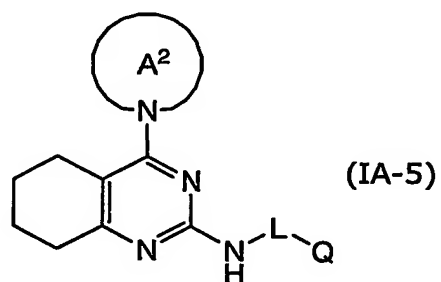
(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I A-3)



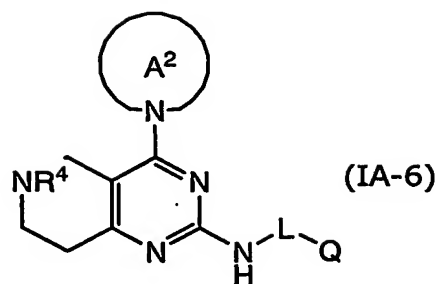
(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
5 一般式 (I A-4)



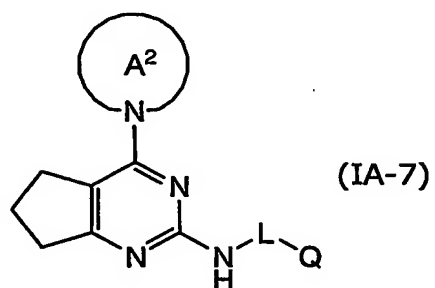
(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I A-5)



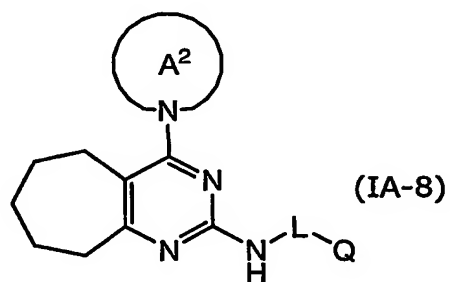
10 (式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I A-6)



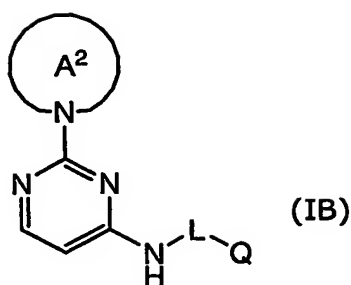
(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I A-7)



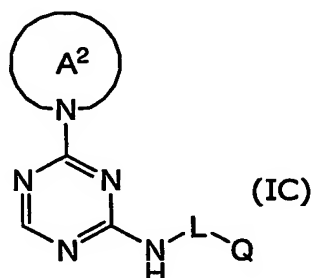
5 (式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I A-8)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)、
一般式 (I B)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。) および一般式 (I C)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。) で示される化合物が挙げられる。

本発明の具体的な化合物としては、実施例に示される化合物および以下に示す化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグが挙げられる。

- (1) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (2) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-(2-エチルブチル)-N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (3) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-メチル-N²-ノニルエタン-1, 2-ジアミン、
- (4) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-メチル-N²-[2-(メチルスルファニル)エチル]エタン-1, 2-ジアミン、

- (5) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナ
ゾリン-2-イル)- N^2 -ベンジル- N^2 -メチルエタン-1, 2-ジアミ
ン、
- (6) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナ
5 ゾリン-2-イル)- N^2 -{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベ
ンジル}- N^2 -メチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (7) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナ
ゾリン-2-イル)- N^2 -メチル- N^2 -[(3-フェニル-1H-ピラゾー
ル-4-イル)メチル]エタン-1, 2-ジアミン、
- 10 (8) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナ
ゾリン-2-イル)- N^2 -メチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (9) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピロリジン-2-イル)
メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (10) 4-アゼパン-1-イル-N-[[1-(2-エチルブチル)ピロリ
15 ジン-2-イル]メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2
-アミン、
- (11) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピロリジン-2-イル)
メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (12) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル)
20 エチル]ピロリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
キナゾリン-2-アミン、
- (13) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピロリジン-2-イ
ル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (14) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミ
25 ノ)プロポキシ]ベンジル}ピロリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7,
8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、

- (15) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピロリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (16) 4-アゼパン-1-イル-N-(ピロリジン-2-イルメチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (17) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (18) 4-アゼパン-1-イル-N-[[1-(2-エチルブチル)ピペリジン-2-イル]メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (19) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (20) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (21) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (22) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (23) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピペリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (24) 4-アゼパン-1-イル-N-(ピペリジン-2-イルメチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
- (25) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-メチルピロリジン-3-イル)

- ー5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(26) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルブチル)ピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(27) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ノニルピロリジン-3-イル)
5ー5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(28) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピロリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(29) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピロリジン-3-イル)
10ー5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(30) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピロリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(31) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピロリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テ
15トラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(32) 4-アゼパン-1-イル-N-ピロリジン-3-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(33) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-メチルピペリジン-3-イル)
20ー5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(34) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
(35) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ノニルピペリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、
25 (36) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリ

ン-2-アミン、

(37) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピペリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、

(38) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テ
5 トラヒドロキナゾリン-2-アミン、

(39) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピペリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テ
トラヒドロキナゾリン-2-アミン、

10 (40) 4-アゼパン-1-イル-N-ピペリジン-3-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン、

(41) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-メチルシクロヘキサン-1, 2-ジアミン、

(42) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
15 ナゾリン-2-イル)-N²-(2-エチルブチル)シクロヘキサン-1, 2-
-ジアミン、

(43) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-ノニルピペリジン-2, 3-ジアミン、

(44) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
20 ナゾリン-2-イル)-N²-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリ
ジン-2, 3-ジアミン、

(45) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-イル)-N²-ベンジルピペリジン-2, 3-ジアミン、

(46) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
25 ナゾリン-2-イル)-N²-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベン
ジル}ピペリジン-2, 3-ジアミン、

- (47) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イ
ル) メチル] ピペリジン-2, 3-ジアミン、
- (48) N-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
5 ナゾリン-2-イル) シクロヘキサ-1, 2-ジアミン、
- (49) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -メチルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (50) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -(2-エチルブチル) シクロペンタン-1, 2
10 -ジアミン、
- (51) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -ノニルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (52) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -[2-(メチルスルファニル) エチル] シクロ
15 ペンタン-1, 2-ジアミン、
- (53) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -ベンジルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (54) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -{4-[3-(ジメチルアミノ) プロポキシ]
20 ベンジル} シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (55) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
ナゾリン-2-イル) - N^2 -[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イ
ル) メチル] シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (56) N-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキ
25 ナゾリン-2-イル) シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (57) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ

リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン、

(58) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-(2-エチルブチル) -
5 N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン、

(59) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチル-N²-ノニルエ
タン-1, 2-ジアミン、

(60) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
10 リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチル-N²-[2-(メ
チルスルファニル) エチル] エタン-1, 2-ジアミン、

(61) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-ベンジル-N²-メチル
エタン-1, 2-ジアミン、

(62) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
15 リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-{4-[3-(ジメチル
アミノ) プロポキシ] ベンジル} -N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン、

(63) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチル-N²-[(3-フ
20 エニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] エタン-1, 2-ジアミン、

(64) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピ
リド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチルエタン-1, 2-
ジアミン、

(65) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピロリジン-2-イル)
25 メチル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン
-2-アミン、

- (66) 4-アゼパン-1-イル-N- {[1-(2-エチルブチル) ピロリジン-2-イル] メチル} -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (67) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピロリジン-2-イル) メチル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (68) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル) エチル] ピロリジン-2-イル} メチル) -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 10 (69) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピロリジン-2-イル) メチル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (70) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピロリジン-2-イル) メチル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 15 (71) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピロリジン-2-イル} メチル) -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (72) 4-アゼパン-1-イル-N-(ピロリジン-2-イルメチル) -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 20 (73) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピペリジン-2-イル) メチル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 25 (74) 4-アゼパン-1-イル-N- {[1-(2-エチルブチル) ピペリジン-2-イル] メチル} -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3

- d] ピリミジン-2-アミン、
(75) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 5 (76) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
(77) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミ
- 10 ジン-2-アミン、
(78) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-2-イル)メチル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
(79) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-ピ
- 15 ラゾール-4-イル)メチル]ピペリジン-2-イル}メチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
(80) 4-アゼパン-1-イル-N-(ピペリジン-2-イルメチル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 20 (81) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-メチルピロリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
(82) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルブチル)ピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピ
- 25 リミジン-2-アミン、
(83) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ノニルピロリジン-3-イル)

ー5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-ア
ミン、

(84) 4-アゼパン-1-イル-N- {1- [2- (メチルスルファニル)
エチル] ピロリジン-3-イル} -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4,
5 3-d] ピリミジン-2-アミン、

(85) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-ベンジルピロリジン-3-イ
ル) -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2
-アミン、

(86) 4-アゼパン-1-イル-N- (1- {4- [3- (ジメチルアミ
10 ノ) プロボキシ] ベンジル} ピロリジン-3-イル) -5, 6, 7, 8-テ
トラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、

(87) 4-アゼパン-1-イル-N- {1- [(3-フェニル-1H-ピラ
ゾール-4-イル) メチル] ピロリジン-3-イル} -5, 6, 7, 8-テ
トラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、

15 (88) 4-アゼパン-1-イル-N-ピロリジン-3-イル-5, 6, 7,
8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、

(89) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-メチルピペリジン-3-イル)
-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-ア
ミン、

20 (90) 4-アゼパン-1-イル-N- [1- (2-エチルブチル) ピペリ
ジン-3-イル] -5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピ
リミジン-2-アミン、

(91) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-ノニルピペリジン-3-イル)
-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-ア
25 ミン、

(92) 4-アゼパン-1-イル-N- {1- [2- (メチルスルファニル)

- エチル] ピペリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (93) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピペリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 5 (94) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-3-イル)-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (95) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピペリジン-3-イル}-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- 10 (96) 4-アゼパン-1-イル-N-ピペリジン-3-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-アミン、
- (97) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル)-N²-メチルシクロヘキサン-1, 2-ジアミン、
- 15 (98) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル)-N²-(2-エチルブチル)シクロヘキサン-1, 2-ジアミン、
- (99) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル)-N²-ノニルピペリジン-2, 3-ジアミン、
- 20 (100) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル)-N²-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-2, 3-ジアミン、
- 25 (101) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ

- ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-ベンジルピペリジン-2, 3-ジアミン、
- (102) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-{4-[3-(ジメチ
5 ルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピペリジン-2, 3-ジアミン、
- (103) N³-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-[(3-フェニル-1
H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-2, 3-ジアミン、
- (104) N-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
10 ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) シクロヘキサン-1, 2-ジ
アミン、
- (105) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチルシクロペンタン
-1, 2-ジアミン、
- 15 (106) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-(2-エチルブチル)
シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (107) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-ノニルシクロペンタン
20 -1, 2-ジアミン、
- (108) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-[2-(メチルスルフ
アニル) エチル] シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (109) N¹-(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
25 ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) -N²-ベンジルシクロペンタ
ン-1, 2-ジアミン、

- (1 1 0) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
 ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -{4-[3-(ジメチ
 ルアミノ) プロポキシ] ベンジル} シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (1 1 1) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
 5 ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -[(3-フェニル-1
 H-ピラゾール-4-イル) メチル] シクロペンタン-1, 2-ジアミン、
- (1 1 2) N -(4-アゼパン-1-イル-5, 6, 7, 8-テトラヒドロ
 ピリド [4, 3-d] ピリミジン-2-イル) シクロペンタン-1, 2-ジ
 アミン、
- 10 (1 1 3) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 , N^2 -ジメチルエタン-1,
 2-ジアミン、
- (1 1 4) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -(2-エチルブチル) - N^2
 15 -メチルエタン-1, 2-ジアミン、
- (1 1 5) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -メチル- N^2 -ノニルエタン
 -1, 2-ジアミン、
- (1 1 6) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 20 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -メチル- N^2 -[2-(メチ
 ルスルファニル) エチル] エタン-1, 2-ジアミン、
- (1 1 7) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -ベンジル- N^2 -メチルエタ
 ン-1, 2-ジアミン、
- 25 (1 1 8) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5 H-シク
 ロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) - N^2 -{4-[3-(ジメチルアミ

- ノ) プロポキシ] ベンジル} -N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン、
 (119) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチル-N²-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] エタン-1, 2-ジアミン、
 5 (120) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン、
 (121) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピロリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 10 (122) 4-アゼパン-1-イル-N-{{1-(2-エチルブチル) ピロリジン-2-イル} メチル} -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 (123) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピロリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 15 (124) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル) エチル] ピロリジン-2-イル} メチル) -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 (125) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピロリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 20 (126) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピロリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
 25 (127) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-

- ピラゾール-4-イル) メチル] ピロリジン-2-イル} メチル) -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (128) 4-アゼパン-1-イル-N- (ピロリジン-2-イルメチル) -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 5 (129) 4-アゼパン-1-イル-N- [(1-メチルピペリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (130) 4-アゼパン-1-イル-N- {[1- (2-エチルブチル) ピペリジン-2-イル] メチル} -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d]
- 10 ピリミジン-2-アミン、
- (131) 4-アゼパン-1-イル-N- [(1-ノニルピペリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (132) 4-アゼパン-1-イル-N- ({1- [2- (メチルスルファニル) エチル] ピペリジン-2-イル} メチル) -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 15 (133) 4-アゼパン-1-イル-N- [(1-ベンジルピペリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (134) 4-アゼパン-1-イル-N- [(1- {4- [3- (ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピペリジン-2-イル) メチル] -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 20 (135) 4-アゼパン-1-イル-N- ({1- [(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-2-イル} メチル) -6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 25 (136) 4-アゼパン-1-イル-N- (ピペリジン-2-イルメチル)

- − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
(137) 4−アゼパン−1−イル−N−(1−メチルピロリジン−3−イル) − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
- 5 (138) 4−アゼパン−1−イル−N−[1−(2−エチルブチル) ピロリジン−3−イル] − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
(139) 4−アゼパン−1−イル−N−(1−ノニルピロリジン−3−イル) − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
- 10 (140) 4−アゼパン−1−イル−N−{1−[2−(メチルスルファニル) エチル] ピロリジン−3−イル} − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
(141) 4−アゼパン−1−イル−N−(1−ベンジルピロリジン−3−イル) − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
- 15 (142) 4−アゼパン−1−イル−N−(1−{4−[3−(ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピロリジン−3−イル) − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
(143) 4−アゼパン−1−イル−N−{1−[(3−フェニル−1 H−ピラゾール−4−イル) メチル] ピロリジン−3−イル} − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
- 20 (144) 4−アゼパン−1−イル−N−ピロリジン−3−イル− 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
(145) 4−アゼパン−1−イル−N−(1−メチルピペリジン−3−イル) − 6, 7−ジヒドロ−5 H−シクロペンタ [d] ピリミジン−2−アミン、
- 25

ン、

(146) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルブチル) ピペリジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、

- 5 (147) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ノニルピペリジン-3-イル)-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、

- (148) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[2-(メチルスルファニル) エチル] ピペリジン-3-イル}-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 10

(149) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピペリジン-3-イル)-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、

- (150) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピペリジン-3-イル)-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 15

(151) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-3-イル}-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、

- 20 (152) 4-アゼパン-1-イル-N-ピペリジン-3-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン、

(153) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-イル)-N²-メチルシクロヘキサン-1, 2-ジアミン、

- 25 (154) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-イル)-N²-(2-エチルブチル) シクロ

ヘキサン-1, 2-ジアミン、

(155) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -ノニルピペリジン-2, 3-ジアミン、

5 (156) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-2, 3-ジアミン、

(157) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -ベンジルピペリジン-2, 3-
10 -ジアミン、

(158) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-2, 3-ジアミン、

(159) N^3 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -[(3-フェニル-1H-ピ
15 ラゾール-4-イル)メチル]ピペリジン-2, 3-ジアミン、

(160) N -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)シクロヘキサ-1, 2-ジアミン、

(161) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -メチルシクロペンタン-1,
20 2-ジアミン、

(162) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -(2-エチルブチル)シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

25 (163) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -ノニルシクロペンタン-1,

2-ジアミン、

(164) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -[2-(メチルスルファニル)エチル]シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

5 (165) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -ベンジルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、

(166) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

10 (167) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

(168) N -(4-アゼパン-1-イル-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-イル)シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

15 (169) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 , N^2 -ジメチルエタン-1, 2-ジアミン、

(170) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -(2-エチルブチル)- N^2 -メチルエタン-1, 2-ジアミン、

20 (171) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -メチル- N^2 -ノニルエタン-1, 2-ジアミン、

25 (172) N^1 -(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)- N^2 -メチル- N^2 -

- [2-(メチルスルファニル)エチル]エタン-1,2-ジアミン、
 (173) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-ベンジル-N²-メチルエタン-1,2-ジアミン、
- 5 (174) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}-N²-メチルエタン-1,2-ジアミン、
- (175) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-メチル-N²-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]エタン-1,2-ジアミン、
- 10 (176) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-メチルエタン-1,2-ジアミン、
- (177) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピロリジン-2-イル)メチル]-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- 15 (178) 4-アゼパン-1-イル-N-{[1-(2-エチルブチル)ピロリジン-2-イル]メチル}-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (179) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピロリジン-2-イル)メチル]-6,7,8,9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- 20 (180) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピロリジン-2-イル}メチル)-6,7,8,9-テトラヒ

- ドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
(181) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピロリジン-2-イル)メチル]-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 5 (182) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピロリジン-2-イル)メチル]-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
(183) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピロリジン-2-イル}メチル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 10 (184) 4-アゼパン-1-イル-N-(ピロリジン-2-イルメチル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
(185) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-メチルピペリジン-2-イル)メチル]-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 15 (186) 4-アゼパン-1-イル-N-{{1-(2-エチルブチル)ピペリジン-2-イル}メチル}-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
(187) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ノニルピペリジン-2-イル)メチル]-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- 20 (188) 4-アゼパン-1-イル-N-({1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-2-イル}メチル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロー5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
(189) 4-アゼパン-1-イル-N-[(1-ベンジルピペリジン-2-
- 25

- イル) メチル] - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d]
ピリミジン-2-アミン、
- (190) 4-アゼパン-1-イル-N- [(1- {4- [3- (ジメチルア
ミノ) プロポキシ] ベンジル} ピペリジン-2-イル) メチル] - 6, 7,
5 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (191) 4-アゼパン-1-イル-N- ({1- [(3-フェニル-1H-
ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-2-イル} メチル) - 6, 7,
8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (192) 4-アゼパン-1-イル-N- (ピペリジン-2-イルメチル)
10 - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-
2-アミン、
- (193) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-メチルピロリジン-3-イ
ル) - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジ
ン-2-アミン、
- 15 (194) 4-アゼパン-1-イル-N- [1- (2-エチルブチル) ピロ
リジン-3-イル] - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ
[d] ピリミジン-2-アミン、
- (195) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-ノニルピロリジン-3-イ
ル) - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジ
20 ン-2-アミン、
- (196) 4-アゼパン-1-イル-N- {1- [2- (メチルスルファニ
ル) エチル] ピロリジン-3-イル} - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5
H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、
- (197) 4-アゼパン-1-イル-N- (1-ベンジルピロリジン-3-
25 イル) - 6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミ
ジン-2-アミン、

- (198) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピロリジン-3-イル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (199) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]ピロリジン-3-イル}-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (200) 4-アゼパン-1-イル-N-ピロリジン-3-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (201) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-メチルピペリジン-3-イル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (202) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (203) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ノニルピペリジン-3-イル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (204) 4-アゼパン-1-イル-N-{1-[2-(メチルスルファニル)エチル]ピペリジン-3-イル}-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (205) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピペリジン-3-イル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、
- (206) 4-アゼパン-1-イル-N-(1-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}ピペリジン-3-イル)-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-アミン、

(207) 4-アゼパン-1-イル-N- {1- [(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-3-イル} -6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、

(208) 4-アゼパン-1-イル-N-ピペリジン-3-イル-6, 7,
5 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-アミン、

(209) N¹- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²-メチルシクロヘキサ-1, 2-ジアミン、

(210) N¹- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²- (2-エチルブチル) シクロヘキサ-1, 2-ジアミン、
10

(211) N³- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²-ノニルピペリジン-2, 3-ジアミン、

(212) N³- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²- [2- (メチルスルファニル) エチル] ピペリジン-2, 3-ジアミン、
15

(213) N³- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²-ベンジルピペリジン-2, 3-ジアミン、
20

(214) N³- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²- {4- [3- (ジメチルアミノ) プロポキシ] ベンジル} ピペリジン-2, 3-ジアミン、

(215) N³- (4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) -N²- [(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル) メチル] ピペリジン-2, 3-ジアミン、
25

(216) N-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)シクロヘキサン-1, 2-ジアミン、

5 (217) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-メチルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、

(218) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-(2-エチルブチル)シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

10 (219) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-ノニルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、

(220) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-[2-(メチルスルファニル)エチル]シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

15 (221) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-ベンジルシクロペンタン-1, 2-ジアミン、

(222) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-{4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジル}シクロペンタン-1, 2-ジアミン、

20 (223) N¹-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ-5H-シクロヘプタ[d]ピリミジン-2-イル)-N²-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]シクロペンタン-1, 2-ジアミンおよび

(224) N-(4-アゼパン-1-イル-6, 7, 8, 9-テトラヒドロ

ー5 H-シクロヘプタ [d] ピリミジン-2-イル) シクロペンタン-1, 2-ジアミン。

一般式 (I) で示される化合物のうち、より好ましい化合物としては、以下の化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグが挙げられる。

- (1) N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン、
- (2) N¹-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン、
- 10 (3) 4-アゼパン-1-イル-N-((3 S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン、
- (4) 4-アゼパン-1-イル-N-((3 S)-1-ベンジルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン、
- (5) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-(2-エチルブチル) 15 ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン、
- (6) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン、
- (7) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-テトラヒドロ-2 H-ピラン-4-イルピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン、
- 20 (8) 4-(3 S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサノールおよび
- (9) (3 S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロヘキシルカルボニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン。

また、上記したもの以外に、一般式 (II) で示される化合物として、以下に示す化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグが挙げられる。

- (1) 5-[(3-アゼチジン-1-イルフェニル) アミノ]-1-(2-ヒドロキシシクロヘキシル) ピペリジン-3-オール、
- (2) 1-(3-ヒドロキシシクロヘキシル)-5-[(6-ピロリジン-1-イルピラジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-3-カルボン酸、
- 5 (3) 1-ブチル-5-[(6-ピペリジン-1-イルピリジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-2-カルボン酸、
- (4) 3-[[5-(3-ヒドロキシアゼパン-1-イル)-1-メチル-1H-ピロール-2-イル] アミノ]-1-[4-(ヒドロキシメチル) シクロヘキシル] ピペリジン-2-カルボン酸、
- 10 (5) 1-[2-({4-ヒドロキシ-1'-[(2-ヒドロキシシクロヘキシル) カルボニル]-1, 4'-ビペリジン-3-イル} アミノ)-6-オキソ-1, 6-ジヒドロピリミジン-4-イル] プロリン、
- (6) 3-[[1-(3-アミノピロリジン-1-イル)-2-メチル-6-オキソ-1, 6-ジヒドロピリミジン-5-イル] アミノ]-1'-[(3-ヒドロキシシクロヘキシル) カルボニル]-1, 3'-ビペリジン-4-カルボン酸、
- 15 (7) 2-(3-[[4-({3-[(メチルアミノ) カルボニル] ピペリジン-1-イル}-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) アミノ] メチル] ピペリジン-1-イル) シクロヘキサンカルボン酸、
- 20 (8) N-(1-{5-[(2-{1-[3-(ヒドロキシメチル) シクロヘキシル] ピペリジン-3-イル} エチル) アミノ] ピリダジン-3-イル} ピペリジン-4-イル) アセトアミド、
- (9) 3-(3-ヒドロキシ-5-{{5-({3-[(メチルスルホニル) アミノ] アゼチジン-1-イル} ピリダジン-3-イル) アミノ} メチル} ピペリジン-1-イル) シクロヘキサンカルボン酸、
- 25 (10) 1-(2-アミノシクロヘキシル)-5-[(6-[2-(ヒドロ

キシメチル) ピロリジン-1-イル] ピリミジン-4-イル} アミノ) メチル] ピペリジン-3-カルボン酸、

(11) 2-アミノ-N-(3-{3-[(4-ピリジン-2-イルキノリン-2-イル) アミノ] ピロリジン-1-イル} シクロヘキシル) シクロヘキサンカルボキサミド、

(12) 1-フェニル-N-[(1-ピリジン-3-イルイソキノリン-3-イル) メチル] ピペリジン-3-アミン、

(13) [4-(7-{[6-(4-ヒドロキシフェニル) ピリジン-3-イル] アミノ}-1H-インドール-2-イル) ピペリジン-1-イル] 酢酸、

(14) 2-(3-{4-[(2-[4-(シクロヘキシルスルホニル)-3-メトキシフェニル] ピリジン-4-イル} メチル) アミノ]-1H-インドール-3-イル} ピペリジン-1-イル)-N-メチルアセトアミド、

(15) {5-[4-{[2-(1-メチルピペリジン-2-イル)-1,3-ベンゾキサゾール-4-イル] アミノ}-3,4-ジヒドロイソキノリン-2-(1H)-イル] チエン-2-イル} (フェニル) メタノン、

(16) (6-{[1-([7-(1-アダマンチルアミノ)-1-ベンゾチエン-2-イル] アミノ) メチル] シクロヘキシル} アミノ} ピリジン-3-イル) (チエン-2-イル) メタノン、

(17) 4-[3-{[6-[(1-ヒドロキシシクロヘキシル) メチル]-6-アザスピロ[4.5]デカ-8-イル} アミノ)-1-ベンゾチエン-4-イル]-N-メチルピペラジン-1-カルボキサミド、

(18) 2-{2-[(5-[4-(メチルスルホニル) ピペラジン-1-イル] ピリミジン-2-イル} アミノ) メチル] ピロリジン-1-イル}-6-フェニルニコチン酸、

(19) N-(1-{[4-メトキシ-4-(1,3-チアゾール-2-イル)シクロヘキシル] (メチル)アミノ}メチル}シクロプロピル)-4-(5,

6, 7, 8-テトラヒドロキノリン-2-イル) - 1H-イミダゾール-2-アミン、

(20) 5 - (1-メチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロキノリン-8-イル) - N - ({5 - [1 - (3, 4, 5, 6-テトラヒドロピリジン-2-イル) ピペリジン-4-イル] ピリジン-3-イル} メチル) ピラジン-2-アミン、

(21) 1 - [3 - (4 - {[4 - (3, 4-ジヒドロキノリン-1 (2H)-イル) - 5-フルオロピリミジン-2-イル] アミノ} ピペリジン-1-イル) フェニル] - 2, 2-ジメチルプロパン-1-オン、

10 (22) 1 - (シクロヘキシルメチル) - 4 - {[メチル (3 - {[4 - (3, 4, 5, 6-テトラヒドロピリジン-2-イルアミノ) フェニル] アミノ} プロピル) アミノ] メチル} シクロヘキサノール、

(23) 4 - (4 - {[4 - (4, 5, 6, 7-テトラヒドロ-1H-1, 3-ジアゼピン-2-イル) ピリミジン-2-イル] アミノ} アゼパン-1-イル) シクロヘキシルメチルカルバメート、

(24) 4 - (3 - {[4 - (1-シアノシクロブチル) ピリミジン-2-イル] アミノ} アゼチジン-1-イル) - 2 - (シクロペンチロキシ) ベンズアミド、

(25) 1 - ({4 - [4 - ({4 - (1-ヒドロキシシクロペンチル) ピリミジン-2-イル] アミノ} メチル) ピペリジン-1-イル] テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル} アセチル) ピペリジン-4-オール、

(26) 1 - (2 - {[2 - (2-テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イルピリジン-4-イル) - 2-アザビシクロ [2. 2. 2] オクタ-4-イル] アミノ} ピリミジン-4-イル) シクロヘプタノール、

25 (27) 3 - ({4 - [3 - ({6 - [ベンジル (エチル) アミノ] ピリダジン-3-イル} アミノ) - 8-アザビシクロ [3. 2. 1] オクタ-8-イ

- ル] - 4 - メチルピペリジン - 1 - イル} カルボニル) フェノール、
- (28) N - ({4 - [{2 - [(4 - アゼパン - 1 - イル - 5 - フェニル - 1, 3 - チアゾール - 2 - イル) アミノ] エチル} (メチル) アミノ] - 1 - ヒドロキシシクロヘキシル} メチル) モルホリン - 4 - カルボキサミド、
- 5 (29) 2 - アゼパン - 1 - イル - 5 - {[1' - (ピリジン - 3 - イルメチル) - 1, 3' - ビピペリジン - 4 - イル] アミノ} チオフェン - 3, 4 - ジカルボニトリル、
- (30) 4 - ({3 - [(2 - ピロリジン - 1 - イルフェニル) アミノ] ピロリジン - 1 - イル} メチル) シクロヘキサノール、
- 10 (31) メチル 4 - (3 - {[6 - (3 - アザビシクロ [3. 1. 1] ヘプタ - 3 - イル) ピリミジン - 4 - イル] アミノ} ピペリジン - 1 - イル) ブタノアート、
- (32) [2 - ({3 - [(4 - アゾカン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] アゼチジン - 1 - イル} メチル) フェニル] (1 - メチルピペリジン - 4 - イル) メタノン、
- 15 (33) N - (6 - アゾナン - 1 - イルピリミジン - 4 - イル) - 1 - [4 - (テトラヒドロ - 2H - ピラン - 4 - イルオキシ) フェニル] アゼパン - 3 - アミン、
- (34) 2 - {3 - [(4 - アゼパン - 1 - イルキナゾリン - 2 - イル) アミノ] ピロリジン - 1 - イル} - 1, 3 - チアゾール - 4 - カルボキサミド、
- 20 (35) N¹ - (4 - アゼパン - 1 - イルチエノ [3, 2 - d] ピリミジン - 2 - イル) - N⁴ - シクロヘキシル - N⁴ - メチルブタン - 1, 4 - ジアミン、
- (36) 4 - アゼパン - 1 - イル - N - (1 - シクロプロピルピペリジン - 3 - イル) - 1, 3 - ベンゾチアゾール - 2 - アミン、
- 25 (37) N - [1 - (1 - ナフチルメチル) アゼチジン - 3 - イル] - 4 - ビペリジン - 1 - イル - 5, 7 - ジヒドロフロ [3, 4 - d] ピリミジン -

2-アミン、

(38) 6-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-フェノキシフェニル)ピペリジン-4-イル]-9H-プリン-2-アミン、

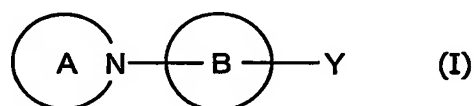
(39) 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-シクロペンチルエチル)アゼパン-4-イル]-1-メチル-1H-ピラゾロ[3,4-d]ピリミジン-6-アミンおよび

(40) N-[4-({3-[(5-アゼパン-1-イルピラジン-2-イル)アミノ]ピペリジン-1-イル}メチル)フェニル]アセトアミド。

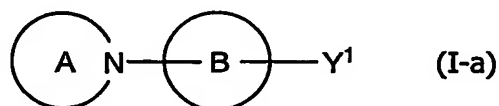
10 [本発明化合物の製造方法]

本発明化合物は、例えば、以下に示す方法、これらに準ずる公知の方法を適宜改良した方法、または実施例に示す方法によって製造することができる。なお、以下の各製造方法において、原料化合物はその塩として用いてもよい。このような塩としては、前記した一般式(I)で示される化合物の塩として記載したものが用いられる。

[1] 一般式(I)

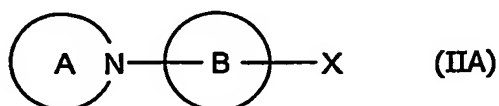


(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物のうち、Yが保護されていてもよいアミノ基、保護されていてもよい水酸基、または保護されていてもよいメルカプト基である化合物、すなわち一般式(I-a)



(式中、Y¹は保護されていてもよいアミノ基、保護されていてもよい水酸基、

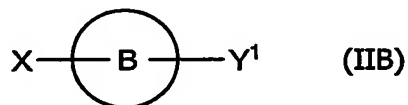
または保護されていてもよいメルカプト基を表わし、その他の記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物は、一般式 (IIA)



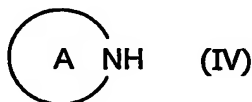
(式中、Xはハロゲン原子、メタンスルホニルオキシ基 (OMs基)、p-トル
 5 エンスルホニルオキシ基 (OTs基)、トリフルオロメタンスルホニルオキシ基 (OTf基)、アルキルチオ基、アルキルスルフィニル基、アルキルスルホニル基、ヒドロキシスルホニル基などの脱離基を表わし、その他の記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物と一般式 (III)



10 (式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物を反応させるか、一般式 (IIB)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物と一般式 (IV)



15

(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物を反応させることによって製造することができる。

一般式 (IIA) で示される化合物と一般式 (III) で示される化合物の反応ならびに一般式 (IIB) で示される化合物と一般式 (IV) で示される化合物の反
 20 応は公知であり、以下の (A) または (B) に示す方法に従って行なうこと

ができる。

(A) 有機溶媒 (N, N-ジメチルホルムアミド、N, N-ジメチルアセトアミド、ジメチルスルホキシド、アルコール系溶媒 (メタノール、エタノール、ベンジルアルコールなど) など) 中または無溶媒で、 $-78^{\circ}\text{C} \sim 200^{\circ}\text{C}$

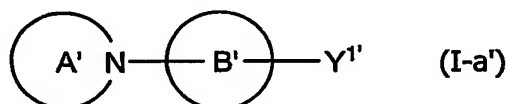
5 の温度で行なうことができる。

(B) 有機溶媒 (トルエン、ベンゼンなど) 中で、金属塩 (酢酸パラジウムなど) および配位子 (トリ (t-ブチル) ホスフィン、ジシクロヘキシル (2-ビフェニル) ホスフィン、2, 2'-ビス (ジフェニルホスフィノ) -1, 1'-ビナフチル (BINAP) など) 存在下で、塩基 (リン酸カリウム、

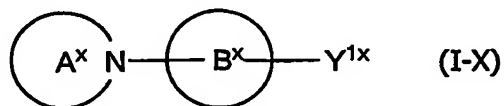
10 炭酸カリウム、ナトリウムt-ブトキシド、水素化ナトリウム、ナトリウムアミルオキシドなど) を添加して、 $-78^{\circ}\text{C} \sim 200^{\circ}\text{C}$ の温度で行なうことができる。

[2] 一般式 (I-a) で示される化合物のうち、環A、環B、 Y^1 またはそれらの置換基に少なくとも一つの一級または二級アミノ基を有する化合物、

15 すなわち一般式 (I-a')



(式中、環A'、環B' および $\text{Y}^{1'}$ はそれぞれ環A、環Bおよび Y^1 と同じ意味を表わす。ただし、それらまたはそれらの置換基のいずれかは少なくとも一つの一級または二級のアミノ基を有する。) で示される化合物は、一般式 (I-a) で示される化合物のうち環A、環B、 Y^1 またはそれらの置換基に少なくとも一つの保護された一級または二級のアミノ基を有する化合物、すなわち一般式 (I-X)



(式中、環A^x、環B^xおよびY^{1x}はそれぞれ環A、環BおよびY¹と同じ意味を表わす。ただし、それらまたはそれらの置換基のいずれかは少なくとも一つの、保護基によって保護された一級または二級のアミノ基を有する)で示される化合物をその保護基の脱保護反応に付すことによって製造することが5 できる。

アミノ基の保護基としては、例えばベンジルオキシカルボニル基、t-ブトキシカルボニル基、アリルオキシカルボニル (Alloc) 基、1-メチル-1-(4-ビフェニル) エトキシカルボニル (Boc) 基、トリフルオロアセチル基、9-フルオレニルメトキシカルボニル基、ベンジル (Bn) 基、p-メトキシベンジル基、ベンジルオキシメチル (BOM) 基、2-(トリメチルシリル) エトキシメチル (SEM) 基等が挙げられる。10

アミノ基の保護基としては、上記した以外にも容易にかつ選択的に脱離できる基であれば特に限定されない。例えば、Protective Groups in Organic Synthesis (T. W. Greene, John Wiley & Sons Inc, 1999) に記載されたものが用い15 られる。

アミノ基の脱保護反応は公知であり、例えば、
(1) アルカリ加水分解、
(2) 酸性条件下における脱保護反応、
(3) 加水素分解による脱保護反応、
20 (4) 金属錯体を用いる脱保護反応が挙げられる。

これらの方法を具体的に説明すると、

(1) アルカリ加水分解による脱保護反応 (例えば、トリフルオロアセチル基等) は、例えば、有機溶媒 (メタノール、テトラヒドロフラン、1, 4-ジオキサンなど) 中、アルカリ金属の水酸化物 (水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化リチウムなど)、アルカリ土類金属の水酸化物 (水酸化バリウム、水酸化カルシウムなど) または炭酸塩 (炭酸ナトリウム、炭酸カリ25

ウムなど)あるいはその水溶液もしくはこれらの混合物を用いて、0～40℃の温度で行なわれる。

(2) 酸条件下での脱保護反応(例えば、*t*-ブトキシカルボニル基、トリチル基等の脱保護反応)は、例えば、水または有機溶媒(ジクロロメタン、クロロホルム、1,4-ジオキサン、酢酸エチル、アニソールなど)中、有機酸(酢酸、トリフルオロ酢酸、メタンスルホン酸など)、または無機酸(塩酸、硫酸など)もしくはこれらの混合物(臭化水素/酢酸など)中、0～100℃の温度で行なわれる。

(3) 加水素分解による脱保護反応(例えば、ベンジル基、ベンズヒドリル基、ベンジルオキシカルボニル基、アリルオキシカルボニル基等の脱保護反応)は、例えば、溶媒(エーテル系(テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサン、ジメトキシエタン、ジエチルエーテルなど)、アルコール系(メタノール、エタノールなど)、ベンゼン系(ベンゼン、トルエンなど)、ケトン系(アセトン、メチルエチルケトンなど)、ニトリル系(アセトニトリルなど)、アミド系(N,N-ジメチルホルムアミドなど)、水、酢酸エチル、酢酸またはそれらの2以上の混合溶媒など)中、触媒(パラジウム-炭素、パラジウム黒、水酸化パラジウム、酸化白金、ラネーニッケルなど)の存在下、常圧または加圧下の水素雰囲気下またはギ酸アンモニウム存在下、0～200℃の温度で行なわれる。

(4) 金属錯体を用いる脱保護反応(例えば、アリルオキシカルボニル基等の脱保護反応)は、例えば、有機溶媒(ジクロロメタン、N,N-ジメチルホルムアミド、テトラヒドロフラン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジオキサン、エタノール等)、水またはそれらの混合溶媒中、トラップ試薬(水素化トリブチルスズ、トリエチルシラン、ジメドン、モルホリン、ジエチルアミン、ピロリジン等)、有機酸(酢酸、ギ酸、2-エチルヘキサン酸等)および/または有機酸塩(2-エチルヘキサン酸ナトリウム、2-エチルヘキサ

ン酸カリウム等)の存在下、ホスフィン系試薬(トリフェニルホスフィン等)の存在下または非存在下、金属錯体(テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム(0)、二塩化ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)、酢酸パラジウム(II)、塩化トリス(トリフェニルホスフィン)ロジウム(I)

5 等)を用いて、0～40℃の温度で行なわれる。

また、上記以外にも、例えば、Protective Groups in Organic Synthesis (T. W. Greene, John Wiley & Sons Inc, 1999)に記載された方法によっても脱保護反応を行なうことができる。

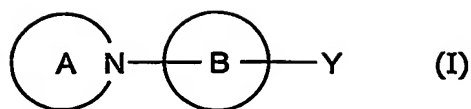
当業者には容易に理解できることではあるが、これらの脱保護反応を使い
10 分けることにより、目的とする本発明化合物を容易に製造することができる。

さらに必要であれば、この反応に引き続いて公知の方法によって、目的の非毒性塩に変換する操作を行なってもよい。

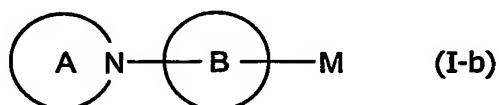
[3]一般式(I-a)で示される化合物は、窒素原子の保護基の脱保護反応によって得られた一般式(I-a')で示される化合物をさらに相当するアルデヒドまたはケトンとの還元的アミノ化反応に付すことによっても製造
15 することができる。

還元的アミノ化反応は公知であり、例えば、不活性有機溶媒(ジクロロエタン、ジクロロメタン、N,N-ジメチルホルムアミド単独で、あるいはそれらのうち複数の溶媒の任意の割合からなる混合溶媒)中、有機酸(酢酸など)
20 ど)存在下または非存在下あるいは、有機塩基(トリエチルアミン、炭酸水素ナトリウムなど)存在下または非存在下、還元剤(トリアセトキシ水素化ホウ素ナトリウム、シアノ水素化ホウ素ナトリウム、水素化ホウ素テトラブチルアンモニウム等)を用いて、0～100℃の温度で反応させることにより行なわれる。

25 一般式(I)

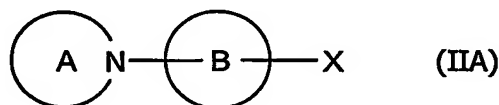


(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物のうち、Yが置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基である化合物、すなわち一般式 (I-b)

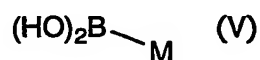


5

(式中、Mは置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を表わし、その他の記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物は、一般式 (IIA)



10 (式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物と一般式 (V)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)で示される化合物を反応させることによって製造することができる。この反応は公知であり、例えば、
 15 有機溶媒 (ベンゼン、トルエン、N, N-ジメチルホルムアミド、1, 4-ジオキサン、テトラヒドロフラン、メタノール、アセトニトリル、ジメトキシエタン、アセトン等) 中、塩基 (ナトリウムエチラート、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、トリエチルアミン、炭酸ナトリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸セシウム、炭酸タリウム、リン酸三カリウム、フッ化セシウム、水酸化バリウム、フッ化テトラブチルアンモニウム等)) もし
 20

くはその水溶液、またはこれらの混合物および触媒（テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（ $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ）、二塩化ビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（ $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ ）、酢酸パラジウム（ $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ ）、パラジウム黒、1, 1'-ビス（ジフェニルホスフィノフェロセン）ジクロロパラジウム（ $\text{PdCl}_2(\text{dppf})_2$ ）、二塩化ジアリルパラジウム（ $\text{PdCl}_2(\text{allyl})_2$ ）、ヨウ化フェニルビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（ $\text{PhPdI}(\text{PPh}_3)_2$ ）等）存在下、
5 室温～120℃で反応させることにより行われる。

〔5〕一般式（I-a）で示される化合物および一般式（I-b）で示される化合物は、当業者にとっては容易に考えられることではあるが、フリーの水酸基、カルボキシル基、アミノ基またはメルカプト基を有する場合、上記
10 の〔1〕～〔4〕の反応に引き続き、水酸基、カルボキシル基、アミノ基またはメルカプト基の保護基の脱保護反応を行なうことによっても製造することができる。

アミノ基の保護基としては、前記したものが挙げられる。

15 水酸基の保護基としては、例えば、メチル基、トリチル基、メトキシメチル（MOM）基、1-エトキシエチル（EE）基、メトキシエトキシメチル（MEM）基、2-テトラヒドロピラニル（THP）基、トリメチルシリル（TMS）基、トリエチルシリル（TES）基、*t*-ブチルジメチルシリル（TBDMS）基、*t*-ブチルジフェニルシリル（TBDPS）基、アセチル（Ac）基、
20 ピバロイル基、ベンゾイル基、ベンジル（Bn）基、*p*-メトキシベンジル基、アリルオキシカルボニル（Alloc）基、2, 2, 2-トリクロロエトキシカルボニル（Troc）基などが挙げられる。

メルカプト基の保護基としては、例えば、ベンジル基、メトキシベンジル基、メトキシメチル（MOM）基、2-テトラヒドロピラニル（THP）基、
25 ジフェニルメチル基、アセチル（Ac）基などが挙げられる。

カルボキシ基の保護基としては、例えば、メチル基、エチル基、*t*-ブチ

ル基、アリル基、フェナシル基、ベンジル基などが挙げられる。

カルボキシ基、水酸基、アミノ基またはメルカプト基の保護基としては、上記した以外にも容易にかつ選択的に脱離できる基であれば特に限定されない。例えば、Protective Groups in Organic Synthesis (T. W. Greene, John Wiley & Sons Inc, 1999) に記載されたものも用いられる。

カルボキシ基、水酸基、アミノ基またはメルカプト基の保護基の脱保護反応は、よく知られており、例えば、

- (1) アルカリ加水分解、
- (2) 酸性条件下における脱保護反応、
- 10 (3) 加水素分解による脱保護反応、
- (4) 金属錯体を用いた脱保護反応、
- (5) 金属を用いた脱保護反応、
- (6) シリル基の脱保護反応などが挙げられる。

(1) ~ (4) は前記の方法に従って行なうことができ、(5) ~ (6) は
15 以下に示す方法に従って行なうことができる。

(5) 金属を用いる脱保護反応は、例えば、酸性溶媒（酢酸、pH 4.2~7.2 の緩衝液またはそれらの溶液とテトラヒドロフランなどの有機溶媒との混合液）中、粉末亜鉛の存在下、必要であれば超音波をかけながら、0℃~40℃の温度で行なわれる。

20 (6) シリル基の脱保護反応は、例えば、水と混和しうる有機溶媒（テトラヒドロフラン、アセトニトリル等）中、テトラブチルアンモニウムフルオリドを用いて、0~40℃の温度で行なわれる。

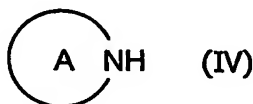
当業者には容易に理解できることではあるが、これらの脱保護反応を使い分けることにより、目的とする本発明化合物が容易に製造することができる。

25 さらに必要であれば、この反応に引き続いて公知の方法によって、目的の非毒性塩に変換する操作を行なってもよい。

一般式 (I) で示される本発明化合物は、上記に示した方法以外に、本明細書中に記載された実施例、あるいは公知の方法、例えば、「Comprehensive Organic Transformations : A Guide to Functional Group Preparations, 2nd Edition (Richard C. Larock, John Wiley & Sons Inc, 1999)」に記載された方法を組み合わ

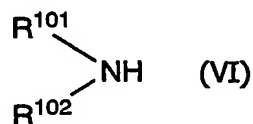
5 せて用いることで製造することができる。

一般式 (II) で示される本発明化合物は、上記に示した一般式 (I) で示される本発明化合物の製造方法において、一般式 (IV)



(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)

10 で示される化合物の代わりに一般式 (VI)

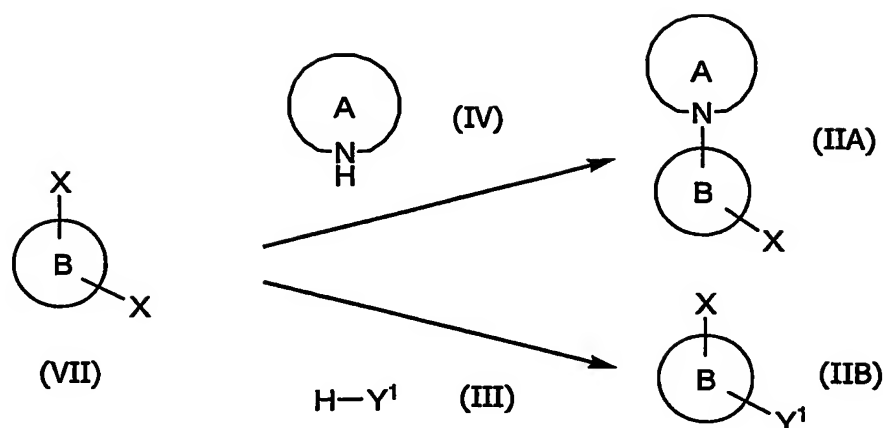


(式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)

で示される化合物を用いることで製造することができる。

本発明において、原料として用いられる一般式 (IIA) および (IIB) で示される化合物は、以下の反応工程式に示される方法に従って製造することができる。

反応工程式



(反応工程式中、すべての記号は前記と同じ意味を表わす。)

その他、本発明で用いられる、一般式 (III)、(IV)、(V)、(VI) および (VII)

- 5 例えば、「Comprehensive Organic Transformations : A Guide to Functional Group Preparations, 2nd Edition (Richard C. Larock, Wiley & Sons Inc, 1999)」に記載された方法を用いることにより容易に製造することができる。

- 10 本明細書中の各反応において、加熱を伴う反応は、当業者にとって明らかのように、水浴、油浴、砂浴またはマイクロウェーブを用いて行なうことができる。

本明細書中の各反応において、適宜、高分子ポリマー（例えば、ポリスチレン、ポリアクリルアミド、ポリプロピレン、ポリエチレングリコール等）に担持させた固相担持試薬を用いてもよい。

- 15 本明細書中の各反応において、反応生成物は通常の精製手段、例えば、常圧下または減圧下における蒸留、シリカゲルまたはケイ酸マグネシウムを用いた高速液体クロマトグラフィー、薄層クロマトグラフィー、イオン交換樹脂、スカベンジャー樹脂あるいはカラムクロマトグラフィーまたは洗浄、再結晶などの方法により精製することができる。精製は各反応ごとに行なってもよいし、いくつかの反応終了後に行なってもよい。

[毒性]

一般式 (I) および (II) で示される本発明化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグの毒性は非常に低いものであり、医薬品として使用するために十分安全である。

5 [医薬品への適用]

一般式 (I) および (II) で示される本発明化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグは、CXCR4調節作用を有するので、例えば、炎症・免疫性疾患、アレルギー性疾患、感染症、特にHIV感染およびそれに随伴する疾患、精神・神経性疾患、脳疾患、心・血管性疾患、代謝性疾患、癌疾患の治療または予防に有効である。

10 また、遺伝子治療のための幹細胞のイン・ビトロ (in vitro) またはイン・ビボ (in vivo) 増幅ならびに末梢血幹細胞動員、組織修復などを目的とした再生医療用剤としても有用である。再生医療の中でも、骨髄移植、末梢血幹細胞移植、組織修復を含めた各臓器移植などに用いられる移植医療用剤として

15 有用である。

炎症・免疫性疾患としては、例えば、慢性関節リウマチ、関節炎、痛風、移植臓器拒絶、移植片対宿主病 (GVHD)、腎炎、乾癬、鼻炎、結膜炎、多発性硬化症、潰瘍性大腸炎、クローン病、細菌感染に伴うショック、肺繊維症、全身性応答症候群 (SIRS)、急性肺障害、糖尿病などが挙げられる。

20 アレルギー性疾患としては、例えば、喘息、アトピー性皮膚炎、鼻炎、結膜炎などが挙げられる。

感染症、特にHIV感染およびそれに随伴する疾患としては、例えば、後天性免疫不症候群 (AIDS)、カンジダ症、カリニ肺炎、サイトメガロウィルス網膜炎、カポジ肉腫、悪性リンパ腫、エイズ脳症、細菌性敗血症などが

25 挙げられる。

精神・神経性疾患、脳疾患としては、例えば、アルツハイマー病を含む痴

呆症、パーキンソン病、脳卒中、脳梗塞、脳出血、てんかん、統合性失調症、末梢神経障害などが挙げられる。

心・血管性疾患としては、例えば、動脈硬化、虚血再灌流傷害、高血圧、心筋梗塞、狭心症、心不全などが挙げられる。

- 5 代謝性疾患としては、例えば、糖尿病、骨粗鬆症、前立腺肥大、頻尿などが挙げられる。

癌疾患としては、例えば、乳癌、悪性リンパ腫等の悪性腫瘍、癌転移、放射線療法／化学療法後の骨髄抑制または血小板減少症などが挙げられる。

- 一般式 (I) および (II) で示される本発明化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグは、
- 10 1) その化合物の予防および／または治療効果の補完および／または増強、
2) その化合物の動態・吸収改善、投与量の低減、
および／または
3) その化合物の副作用の軽減のために他の薬剤と組み合わせて、併用剤として投与してもよい。
- 15

- 一般式 (I) および (II) で示される本発明化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグと他の薬剤の併用剤は、1つの製剤中に両成分を配合した配合剤の形態で投与してもよく、また別々の製剤にして投与する形態をとってもよい。この別々の製剤にして
- 20 投与する場合には、同時投与および時間差による投与が含まれる。また、時間差による投与は、一般式 (I) および (II) で示される化合物を先に投与し、他の薬剤を後に投与してもよいし、他の薬剤を先に投与し、一般式 (I) および (II) で示される化合物を後に投与してもかまわず、それぞれの投与方法は同じでも異なってもよい。

- 25 上記併用剤により、予防および／または治療効果を奏する疾患は特に限定されず、一般式 (I) および (II) で示される化合物の予防および／または治

療効果を補完および／または増強する疾患であればよい。

一般式 (I) および (II) で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグと組み合わせて用いられる他のHIV感染および後天性免疫不全症候群の予防および／または治療
5 剤の例としては、逆転写酵素阻害薬、プロテアーゼ阻害薬、ケモカイン（例えば、CCR2、CCR3、CCR4、CCR5、CXCR4など）拮抗薬、フュージョン阻害薬、HIV-1の表面抗原に対する抗体、HIV-1のワクチンなどが挙げられる。

逆転写酵素阻害薬として、具体的には、例えば (1) 核酸系逆転写酵素阻
10 害薬のジドブジン（商品名：レトロビル）、ジダノシン（商品名：ヴァイデックス）、ザルシタビン（商品名：ハイビッド）、スタブジン（商品名：ゼリット）、ラミブジン（商品名：エビビル）、アバカビル（商品名：ザイアジェン）、アデフォビル、ジビボキシル、エントリシタビン（商品名：コビラシル）、テノフォビル（商品名：ビリヤド）など、(2) 非核酸系逆転写酵素阻害薬のネ
15 ビラピン（商品名：ピラミューン）、デラビルジン（商品名：レスクリプター）、エファビレンツ（商品名：サスティバ、ストックリン）、カブラヴィリン（AG1549）などが挙げられる。

プロテアーゼ阻害薬として、具体的には、例えばインジナビル（商品名：クリキシバン）、リトナビル（商品名：ノービア）、ネルフィナビル（商品名：
20 ビラセプト）、サキナビル（商品名：インビラーゼ、フォートベース）、アンブリナビル（商品名：エジネラーゼ）、ロビナビル（商品名：カレトラ）、ティプラナビルなどが挙げられる。

ケモカイン拮抗薬としては、ケモカインレセプターの内因性のリガンド、またはその誘導体および非ペプチド性低分子化合物、またはケモカインレセ
25 プターに対する抗体が含まれる。

ケモカインレセプターの内因性のリガンドとしては、具体的には、例えば

MIP-1 α 、MIP-1 β 、RANTES、SDF-1 α 、SDF-1 β 、MCP-1、MCP-2、MCP-4、エオタキシン (Eotaxin)、MDCなどが挙げられる。

内因性リガンドの誘導体としては、具体的には、例えばAOP-RANTES、Met-SDF-1 α 、Met-SDF-1 β などが挙げられる。

ケモカインレセプターの抗体としては、具体的には、Pro-140などが挙げられる。

CCR2拮抗薬としては、具体的には、例えばWO99/07351号、WO99/40913号、WO00/46195号、WO00/46196号、WO00/46197号、WO00/46198号、WO00/46199号、WO00/69432号、WO00/69815号またはBioorg. Med. Chem. Lett., 10, 1803 (2000)に記載された化合物などが挙げられる。

CCR3拮抗薬としては、具体的には、例えばDE19837386号、WO99/55324号、WO99/55330号、WO00/04003号、WO00/27800号、WO00/27835号、WO00/27843号、WO00/29377号、WO00/31032号、WO00/31033号、WO00/34278号、WO00/35449号、WO00/35451号、WO00/35452号、WO00/35453号、WO00/35454号、WO00/35876号、WO00/35877号、WO00/41685号、WO00/51607号、WO00/51608号、WO00/51609号、WO00/51610号、WO00/53172号、WO00/53600号、WO00/58305号、WO00/59497号、WO00/59498号、WO00/59502号、WO00/59503号、WO00/62814号、WO00/73327号またはWO01/09088号に記載された化合物などが挙げられる。

CCR4拮抗薬としては、具体的には、例えばWO02/030357号、WO02/030358号に記載された等が挙げられる。

CCR5拮抗薬としては、具体的には、例えばTAK-779、TAK-220、SCH-D、SCH-C等が挙げられる。さらに、例えばWO99/17773号、WO99/32100号、WO00/06085号、WO00/06146号、WO00/10965号、WO00/06153号、WO00/21916号、WO00/37455号、EP1013276号、WO00/38680

号、WO00/39125 号、WO00/40239 号、WO00/42045 号、WO00/53175 号、
WO00/42852 号、WO00/66551 号、WO00/66558 号、WO00/66559 号、WO00/66141
号、WO00/68203 号、JP2000309598 号、WO00/51607 号、WO00/51608 号、
WO00/51609 号、WO00/51610 号、WO00/56729 号、WO00/59497 号、WO00/59498
5 号、WO00/59502 号、WO00/59503 号、WO00/76933 号、WO98/25605 号、
WO99/04794 号、WO99/38514 号または Bioorg. Med. Chem. Lett., 10, 1803 (2000)
に記載された化合物などが挙げられる。

C X C R 4 拮抗薬としては、具体的には、例えば AMD-3100、T-22、
KRH-1120、KRH-1636 または WO00/66112 号に記載された化合物などが挙げ
10 られる。

フュージョン阻害薬としては、具体的には、例えば T-20 (pentafuside)、
T-1249 などが挙げられる。

以上の併用薬剤は例示であって、本発明はこれらに限定されるものではない。

15 代表的な逆転写酵素阻害薬およびプロテアーゼ阻害薬の通常の臨床投与量
は、例えば、以下に示すとおりであるが、本発明はこれらに限定されるもの
ではない。

ジドブジン：100mg カプセル、1 回 200mg、1 日 3 回；

300mg 錠剤、1 回 300mg、1 日 2 回；

20 ジダノシン：25～200mg 錠剤、1 回 125～200mg、1 日 2 回；

ザルシタピン：0.375mg～0.75mg 錠剤、1 回 0.75mg、1 日 3 回；

スタブジン：15～40mg カプセル、1 回 30～40mg、1 日 2 回；

ラミブジン：150mg 錠剤、1 回 150mg、1 日 2 回；

アバカビル：300mg 錠剤、1 回 300mg、1 日 2 回；

25 ネビラピン：200mg 錠剤、1 回 200mg、14 日間 1 日 1 回、その後 1 日 2 回；

デラビルジン：100mg 錠剤、1 回 400mg、1 日 3 回；

エファビレンツ：50～200mgカプセル、1回600mg、1日1回；

インジナビル：200～400カプセル、1回800mg、1日3回；

リトナビル：100mgカプセル、1回600mg、1日2回；

ネルフィナビル：250mg錠剤、1回750mg、1日3回；

5 サキナビル：200mgカプセル、1回1,200mg、1日3回；

アンブレナビル：50～150mg錠剤、1回1,200mg、1日2回。

一般式（I）および（II）で示される化合物の喘息に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、抗ヒスタミン薬、抗アレルギー薬（化学伝達物質遊離抑制薬、ヒスタミン拮抗薬、トロンボキサン合成酵素阻害薬、トロンボキサン拮抗薬、Th2サイトカイン阻害薬）、ステロイド剤、気管支拡張薬（キサンチン誘導体、交感神経刺激薬、副交感神経遮断薬）、ワクチン療法剤、金製剤、漢方製剤、塩基性非ステロイド抗炎症薬、5-リボキシゲナーゼ阻害薬、5-リボキシゲナーゼ活性化タンパク質拮抗薬、ロイコトリエン合成阻害薬、プロスタグランジン類、カンナビノイド-2受容体刺激剤、鎮咳薬、去痰薬などが挙げられる。

抗ヒスタミン薬としては、例えば、ジフェンヒドラミン、塩酸ジフェニルピラリン、テオクル酸ジフェニルピラリン、フマル酸クレマスチン、ジメンヒドリナート、d,l-マレイン酸クロルフェニラミン、d-マレイン酸クロルフェニラミン、塩酸トリプロリジン、塩酸プロメタジン、酒石酸アリメマジン、塩酸イソチペンジル、塩酸ホモクロルシクリジン、ヒドロキシジン、塩酸シプロヘプタジン、塩酸レボカバスチン、アステミゾール、ベポタスチン、デスロラタジン、TAK-427、ZCR-2060、NIP-530、モメタゾンフロエート、ミゾラスチン、BP-294、アンドラスト、オーラノフィン、アクリバスチンなどが挙げられる。

25 抗アレルギー薬のうち、化学伝達物質遊離抑制薬としては、例えば、クロモグリク酸ナトリウム、トラニラスト、アンレキサノクス、レピリナスト、

イブジラスト、ペミロラストカリウム、ダザノラスト、ネドクロミル、クロモグリカート、イスラパファントなどが挙げられる。

抗アレルギー薬のうち、ヒスタミン拮抗薬としては、例えば、フマル酸ケトチフェン、塩酸アゼラスチン、オキサトミド、メキタジン、テルフェナジン、
5 フマル酸エメダスチン、塩酸エピナスチン、エバスチン、塩酸セチリジン、塩酸オロパタジン、ロラタジン、フェキソフェナジンなどが挙げられる。

抗アレルギー薬のうち、トロンボキサン合成酵素阻害薬としては、例えば、塩酸オザグレル、イミトロダストナトリウムなどが挙げられる。

抗アレルギー薬のうち、トロンボキサン拮抗薬としては、例えば、セラトロダスト、ラマトロバン、ドミトロバンカルシウム水和物、K T-2-96
10 2などが挙げられる。

抗アレルギー薬のうち、Th2サイトカイン阻害薬としては、例えば、トシル酸スプラタストなどが挙げられる。

ステロイド剤としては、例えば、外用薬としては、プロピオン酸クロベタ
15 ザール、酢酸ジフロラゾン、フルオシノニド、フランカルボン酸モメタゾン、ジプロピオン酸ベタメタゾン、酪酸プロピオン酸ベタメタゾン、吉草酸ベタメタゾン、ジフルプレドナート、ブデソニド、吉草酸ジフルコルトロン、アムシノニド、ハルシノニド、デキサメタゾン、プロピオン酸デキサメタゾン、吉草酸デキサメタゾン、酢酸デキサメタゾン、酢酸ヒドロコルチゾン、酪酸
20 ヒドロコルチゾン、酪酸プロピオン酸ヒドロコルチゾン、プロピオン酸デプロドン、吉草酸酢酸プレドニゾロン、フルオシノロンアセトニド、プロピオン酸ベクロメタゾン、トリウムシノロンアセトニド、ピバル酸フルメタゾン、プロピオン酸アルクロメタゾン、酪酸クロベタゾン、プレドニゾロン、プロピオン酸ベクロメタゾン、フルドロキシコルチドなどが挙げられ、内服薬、
25 注射剤としては、酢酸コルチゾン、ヒドロコルチゾン、リン酸ヒドロコルチゾンナトリウム、コハク酸ヒドロコルチゾンナトリウム、酢酸フルドロコル

チゾン、プレドニゾン、酢酸プレドニゾン、コハク酸プレドニゾンナ
トリウム、ブチル酢酸プレドニゾン、リン酸プレドニゾンナトリウム、
酢酸ハロプレドン、メチルプレドニゾン、酢酸メチルプレドニゾン、コ
5 ハク酸メチルプレドニゾンナトリウム、トリアムシノロン、酢酸トリアム
シノロン、トリアムシノロンアセトニド、デキサメタゾン、酢酸デキサメ
タゾン、リン酸デキサメタゾンナトリウム、パルミチン酸デキサメタゾン、酢
酸パラメタゾン、ベタメタゾンなどが挙げられ、吸入剤としては、プロピオ
ン酸ベクロメタゾン、プロピオン酸フルチカゾン、ブデソニド、フルニソリ
ド、トリアムシノロン、ST-126P、シクレソニド、デキサメタゾンパ
10 ロミチオネート、モメタゾンフランカルボネート、プラステロンスルホネー
ト、デフラザコート、メチルプレドニゾロンスレプタネート、メチルプレド
ニゾロンナトリウムスクシネートなどが挙げられる。

気管支拡張薬のうち、キサンチン誘導体としては、例えば、アミノフィリ
ン、テオフィリン、ドキシフィリン、シバムフィリン、ジプロフィリン、プ
15 ロキシフィリン、コリンテオフィリンなどが挙げられる。

気管支拡張薬のうち、交感神経刺激薬としては、例えば、エピネフリン、
塩酸エフェドリン、dl-塩酸メチルエフェドリン、塩酸メトキシフェナミ
ン、硫酸イソプロテレノール、塩酸イソプロテレノール、硫酸オルシプレナ
リン、塩酸クロルブレナリン、塩酸トリメトキノール、硫酸サルブタモール、
20 硫酸テルブタリン、硫酸ヘキソブレナリン、塩酸ツロブテロール、塩酸プロ
カテロール、臭化水素酸フェノテロール、フマル酸フォルモテロール、塩酸
クレンブテロール、塩酸マブテロール、キシナホ酸サルメテロール、R,
R-フォルモテロール、ツロブテロール、塩酸ピルブテロール、塩酸リトドリ
ン、バンブテロール、塩酸ドベキサミン、酒石酸メルアドリン、AR-C6
25 8397、レボサルブタモール、KUR-1246、KUL-7211、A
R-C89855、S-1319などが挙げられる。

気管支拡張薬のうち、副交感神経遮断薬としては、例えば、臭化イプラトロピウム、臭化フルトロピウム、臭化オキシトロピウム、臭化シメトロピウム、テミベリン、臭化チオトロピウム、レバトロペート（UK-112166）などが挙げられる。

- 5 ワクチン療法剤としては、例えば、パスパート、アストレメジン、ブロンカスマ・ペルナ、CS-560などが挙げられる。

金製剤としては、例えば、金チオリンゴ酸ナトリウムなどが挙げられる。

塩基性非ステロイド抗炎症薬としては、例えば、塩酸チアラミド、塩酸チノリジン、エピリゾール、エモルファゾンなどが挙げられる。

- 10 5-リポキシゲナーゼ阻害薬としては、例えば、ザイリュートン、ドセベノン、ピリポスト、SCH-40120、WY-50295、E-6700、ML-3000、TMK-688、ZD-2138、メシル酸ダルブフェロン、R-68151、E-6080、DuP-654、SC-45662、CV-6504、NE-11740、CMI-977、NC-2000、E-3040、PD-136095、CMI-392、TZI-41078、Orf-20485、IDB-18024、BF-389、A-78773、TA-270、FLM-5011、CGS-23885、A-79175、ETH-615などが挙げられる。

- 15 5-リポキシゲナーゼ活性化タンパク質拮抗薬としては、例えば、MK-591、MK-886などが挙げられる。

- 20 ロイコトリエン合成阻害薬としては、例えば、オーラノフィン、マレイン酸プログルメタシン、L-674636、A-81834、UPA-780、A-93178、MK-886、REV-5901A、SCH-40120、MK-591、Bay-x-1005、Bay-y-1015、DTI-026、アムレキサノックス、E-6700などが挙げられる。

プロスタグランジン類（以下、PGと略記する。）としては、PG受容体作

動薬、PG受容体拮抗薬などが挙げられる。

PG受容体としては、PGE受容体(EP1、EP2、EP3、EP4)、PGD受容体(DP、CRTH2)、PGF受容体(FP)、PGI受容体(IP)、TX受容体(TP)などが挙げられる。

- 5 鎮咳薬としては、例えば、リン酸コデイン、リン酸ジヒドロコデイン、オキシメテパノール、臭化水素酸デキストロメトルファン、クエン酸ペントキシベリン、リン酸ジメモルファン、クエン酸オキセラジン、クロペラスチン、リン酸ベンプロペリン、塩酸クロフェダノール、塩酸ホミノベン、ノスカピン、ヒベンズ酸チペミジン、塩酸エブラジノン、シャゼンソウエキスなどが
10 挙げられる。

- 去痰薬としては、例えば、アンモニアウイキョウ精、炭酸水素ナトリウム、ヨウ化カリウム、塩酸プロムヘキシン、桜皮エクス、カルボシステイン、フドステイン、塩酸アンプロキシソール、塩酸アンプロキシゾール徐放剤、メチルシステイン塩酸塩、アセチルシステイン、塩酸L-エチルシステイン、チロ
15 キサポールなどが挙げられる。

- 一般式(I)および(II)で示される化合物のアトピー性皮膚炎(蕁麻疹など)に対する予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、例えば、ステロイド剤、非ステロイド系抗炎症薬(NSAID)、免疫抑制剤、プロスタグランジン類、抗アレルギー薬、メディエ
20 ーター遊離抑制薬、抗ヒスタミン薬、フォルスコリン製剤、ホスホジエステラーゼ阻害薬、カンナビノイド-2受容体刺激剤などが挙げられる。

- 一般式(I)で示される化合物のアレルギー性疾患(アレルギー性気管支肺アスペルギルス症、アレルギー性好酸球性胃腸症など)に対する予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、
25 例えば、抗喘息薬、吸入ステロイド、吸入 β 2刺激薬、メチルキサンチン系喘息薬、抗アレルギー薬、抗炎症薬、抗コリン薬などが挙げられる。また、

トロンボキサン拮抗薬、ロイコトリエン拮抗薬、LT₄拮抗薬、PAF拮抗薬、ホスホジエステラーゼ阻害薬、 β 2作動剤、ステロイド剤、メディエーター遊離抑制剤、好酸球化学遊走抑制剤、マクロライド系抗生剤、免疫抑制剤、減感作療法（アレルゲン）注射剤などが挙げられる。

- 5 抗喘息薬としては、例えば、テオフィリン、プロカテロール、ケトチフェン、アゼラスチンなどが挙げられる。

吸入ステロイドとしては、例えば、ベクロメタゾン、フルチカゾン、ブデソナイドなどが挙げられる。

- 10 吸入 β 2刺激薬としては、例えば、フェノテロール、サブタモール、フォルモテロール、サルメテロールなどが挙げられる。

メチルキサンチン系喘息薬としては、例えば、テオフィリンなどが挙げられる。

- 15 抗アレルギー薬としては、例えば、ケトチフェン、テルフェナジン、アゼラスチン、エピナスチン、スプラタスト、クロモグリク酸ナトリウムなどが挙げられる。

抗炎症薬としては、例えば、ジクロフェナクナトリウム、イブプロフェン、インドメタシンなどが挙げられる。

抗コリン薬としては、例えば、臭化イプラトロピウム、臭化フルトロピウム、臭化オキシトロピウム、臭化チオトロピウムなどが挙げられる。

- 20 トロンボキサン拮抗薬としては、例えば、オザグレル、セラトロダストなどが挙げられる。

ロイコトリエン拮抗薬としては、例えば、برانルカスト、モンテルカスト、ザフリルカスト、ザリユートンなどが挙げられる。

- 25 マクロライド系抗生剤としては、例えば、エリスロマイシン、ロキシスロマイシンなどが挙げられる。

免疫抑制剤としては、例えば、シクロスポリン、タクロリムス、F T Y 7

20などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の肝炎に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、肝水解物製剤、ポリエノスファチジルコリン、グリチルリチン製剤、プロ
5 トポルフィリンナトリウム、ウルソデオキシコール酸、ステロイド薬、抗コリン薬、制酸薬、プロバゲルマニウム、脂質過酸化酵素阻害薬、ミトコンドリアルベンゾジアゼピン受容体拮抗薬などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の関節炎および慢性関節リウマチに対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための
10 他の薬剤としては、例えば、メタロプロテイナーゼ阻害薬、免疫抑制剤、非ステロイド系抗炎症薬 (NSAID)、ステロイド剤、プロスタグランジン類、ホスホジエステラーゼ阻害薬、カンナビノイド-2 受容体刺激薬、疾患修飾性抗リウマチ剤 (遅効性抗リウマチ剤)、消炎酵素剤、軟骨保護剤、T細胞阻害薬、TNF α 阻害薬、プロスタグランジン合成酵素阻害薬、IL-6阻害
15 薬、インターフェロン γ 作動薬、IL-1阻害薬などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の乾癬に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては例えば、ステロイド剤、ビタミンD誘導体、などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の鼻炎に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、
20 抗ヒスタミン薬、メディエーター遊離抑制薬、トロンボキサン合成酵素阻害薬、トロンボキサンA₂受容体拮抗薬、ロイコトリエン受容体拮抗薬、ステロイド剤、 α アドレナリン受容体刺激薬、キサンチン誘導体、抗コリン薬、プロスタグランジン類、一酸化窒素合成酵素阻害薬、 β_2 アドレナリン受容体刺激薬、ホスホジエステラーゼ阻害薬、カンナビノイド-2 受容体刺激剤など
25 が挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の結膜炎に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、ロイコトリエン受容体拮抗薬、抗ヒスタミン薬、メディエーター遊離抑制薬、非ステロイド系抗炎症薬、プロスタグランジン類、ステロイド剤、一酸化窒素合成酵素阻害薬、カンナビノイド-2 受容体刺激剤などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の多発性硬化症に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、免疫抑制剤、カンナビノイド-2 受容体刺激剤などが挙げられる。

10 一般式 (I) および (II) で示される化合物の潰瘍性大腸炎に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、メサラジン、サラゾスルファピリジン、消化管潰瘍用剤、抗コリン薬、ステロイド薬、5-リボキシゲナーゼ阻害薬、抗酸化薬、LTB₄拮抗薬、局所麻酔薬、免疫抑制薬、防御因子増強薬、MMP阻害薬、ミトコンドリアルベンゾジアゼピン受容体拮抗薬などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の糖尿病合併症治療に対する予防および／または治療効果の補完および／または増強のための他の薬剤としては、例えば、スルフォニル尿素系血糖低下剤、ビグアナイド系製剤、 α -グルコシダーゼ阻害薬、速効型インスリン分泌促進剤、インスリン製剤、PPAR作動薬、PPARアゴニスト作用を有しないインスリン感受性増強剤、 β 3アドレナリン受容体作動薬、アルドース還元酵素阻害薬、ジペプチジルペプチダーゼIV阻害薬などが挙げられる。

スルホニルウレア剤としては、例えば、アセトヘキサミド、グリベンクラミド、グリクラジド、グリクロピラミド、クロルプロパミド、トラザミド、トルブタミド、グリメピリドなどが挙げられる。

ビグアナイド系製剤としては、例えば、塩酸ブフォルミン、塩酸メトフォ

ルミンなどが挙げられる。

α -グルコシダーゼ阻害薬としては、例えば、アカルボース、ボグリボースなどが挙げられる。

速効型インスリン分泌促進剤としては、例えば、ナテグリニド、レバグリニドなどが挙げられる。

PPAR作動薬としては、例えば、ピオグリタゾン、トログリタゾン、ロシグリタゾン、JTT-501などが挙げられる。

PPARアゴニスト作用を有しないインスリン感受性増強剤としては、例えば、ONO-5816、YM-440などが挙げられる。

10 β 3アドレナリン受容体作動薬としては、例えば、AJ9677、L750355、CP331648などが挙げられる。

アルドース還元酵素阻害薬としては、例えば、エパルレスタット、フィダレスタット、ゼナレスタットなどが挙げられる。

一般式(I)および(II)で示される化合物の癌(悪性腫瘍)や癌転移の予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、例えば、抗癌剤(MMP阻害薬、アルキル化薬(シクロフォスファミド、メルファラン、チオテパ、マイトマイシンC、ブスルファン、塩酸プロカルバジンなど)、代謝拮抗薬(メトトレキサート、メルカプトプリン、アザチオプリン、フルオロウラシル、テガフル、シタラビン、アザセリンなど)、
15 抗生物質(マイトマイシンC、プレオマイシン、ペプロマイシン、塩酸ドキソルピシン、アクラルピシン、ダウノルピシン、アクチノマイシンD)、有糸分裂阻害薬)、白金錯体(シスプラチン)、植物由来抗悪性腫瘍薬(硫酸ビンクリスチン、硫酸ビンブラスチンなど)、抗腫瘍性ホルモン(メチルテストステロン、プロピオンサンテストステロン、エナント酸テストステロン、メ
20 ピチオスタン、ホスフェストロール、酢酸クロルマジノンなど)、免疫賦活薬(ピシバニール、クレスチンなど)、インターフェロン(IFN α 、IFN α

ー 2 a、IFN α -2 b、IFN β 、IFN γ -1 a など) などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の免疫疾患 (自己免疫疾患、移植臓器拒絶反応など) の予防および/または治療効果の補完および/または
5 増強のための他の薬剤としては、例えば、免疫抑制剤 (シクロスポリン、タクロリムス、FTY720 など) などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物のアルツハイマー型老年痴呆症などの痴呆症に対する予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、例えば、アセチルコリンエステラーゼ阻害薬、
10 ニコチン受容体調節剤、脳循環代謝改善薬、モノアミンオキシダーゼ阻害薬、ビタミン E、アルドース還元酵素阻害薬などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物のてんかんに対する予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、例えば、フェニトイン、トリメタジオン、エトスクシミド、カルバマゼピン、
15 フェノバルビタール、プリミドン、アセタゾラミド、スルチアム、バルプロ酸ナトリウム、クロナゼパム、ジアゼパム、ニトラゼパムなどが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物の動脈硬化に対する予防および/または治療効果の補完および/または増強のための他の薬剤としては、例えば、HMG-CoA還元酵素阻害薬、フィブラート系製剤、プロブコール
20 製剤、陰イオン交換樹脂、EPA製剤、ニコチン酸製剤、MTP阻害薬、その他の抗高コレステロール薬、EDG-2拮抗薬などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物を再生医療に用いる際のその効果の補完および/または増強を目的とした他の薬剤としては、サイトカイン類や各種増殖因子、例えば各種CSF (G-CSF、GM-CSF など)、各種
25 インターロイキン (IL-3、6、7、11、12 など)、EPO、TPO、SCF、FLT3リガンド、MIP-1 α などが挙げられる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物と他の薬剤の質量比は特に限定されない。

他の薬剤は、任意の 2 種以上を組み合わせ投与してもよい。

また、一般式 (I) および (II) で示される化合物の予防および／または治療効果を補完および／または増強する他の薬剤には、上記したメカニズムに基づいて、現在までに見出されているものだけでなく今後見出されるものも含まれる。

一般式 (I) および (II) で示される化合物、または一般式 (I) および (II) で示される化合物と他の薬剤の併用剤を上記の目的で用いるには、通常、全身的または局所的に、経口または非経口の形で投与されるが、治療に際して最も効果的な投与経路を選択することが望ましい。

投与量は、年齢、体重、症状、治療効果、投与方法、処理時間などにより異なるが、通常、成人一人当たり、一回につき、1 ng から 100 mg の範囲で一日一回から数回経口投与されるか、または成人一人当たり、一回につき、0.1 ng から 10 mg の範囲で一日一回から数回非経口投与されるか、または一日 1 時間から 24 時間の範囲で静脈内に持続投与される。

もちろん前記したように、投与量は種々の条件により変動するので、上記投与量より少ない量で十分な場合もあるし、また範囲を越えて投与の必要な場合もある。

一般式 (I) および (II) で示される化合物、または一般式 (I) および (II) で示される化合物と他の薬剤の併用剤を投与する際には、経口投与のための内服用固形剤、内服用液剤および、非経口投与のための注射剤、外用剤、坐剤などとして用いられる。

経口投与のための内服用固形剤には、錠剤、丸剤、カプセル剤、散剤、顆粒剤などが含まれる。カプセル剤には、ハードカプセルおよびソフトカプセルが含まれる。

このような内服用固形剤においては、ひとつまたはそれ以上の活性物質はそのままか、または賦形剤（ラクトース、マンニトール、グルコース、微結晶セルロース、デンプンなど）、結合剤（ヒドロキシプロピルセルロース、ポリビニルピロリドン、メタケイ酸アルミン酸マグネシウムなど）、崩壊剤（纖維素グリコール酸カルシウムなど）、滑沢剤（ステアリン酸マグネシウムなど）、安定剤、溶解補助剤（グルタミン酸、アスパラギン酸など）などと混合され、常法に従って製剤化して用いられる。また、必要によりコーティング剤（白糖、ゼラチン、ヒドロキシプロピルセルロース、ヒドロキシプロピルメチルセルロースフタレートなど）で被覆していてもよいし、また2以上の層で被覆していてもよい。さらにゼラチンのような吸収されうる物質のカプセルも包含される。

経口投与のための内服用液剤は、薬剂的に許容される水剤、懸濁剤、乳剤、シロップ剤、エリキシル剤などを含む。このような液剤においては、ひとつまたはそれ以上の活性物質が、一般的に用いられる希釈剤（精製水、エタノールまたはそれらの混液など）に溶解、懸濁または乳化される。さらにこの液剤は、湿潤剤、懸濁化剤、乳化剤、甘味剤、風味剤、芳香剤、保存剤、緩衝剤などを含有していてもよい。

非経口投与のための注射剤としては、溶液、懸濁液、乳濁液および用時溶剤に溶解または懸濁して用いる固形の注射剤を包含する。注射剤は、ひとつまたはそれ以上の活性物質を溶剤に溶解、懸濁または乳化させて用いられる。溶剤として、例えば注射用蒸留水、生理食塩水、植物油、プロピレングリコール、ポリエチレングリコール、エタノールのようなアルコール類などおよびそれらの組み合わせが用いられる。さらにこの注射剤は、安定剤、溶解補助剤（グルタミン酸、アスパラギン酸、ポリソルベート80（登録商標）など）、懸濁化剤、乳化剤、無痛化剤、緩衝剤、保存剤などを含んでいてもよい。これらは最終工程において滅菌するか無菌操作法によって調製される。また

無菌の固形剤、例えば凍結乾燥品を製造し、その使用前に無菌化または無菌の注射用蒸留水または他の溶剤に溶解して使用することもできる。

非経口投与のための外用剤の剤形には、例えば、軟膏剤、ゲル剤、クリーム剤、湿布剤、貼付剤、リニメント剤、噴霧剤、吸入剤、スプレー剤、エアゾル剤、点眼剤および点鼻剤などが含まれる。これらはひとつまたはそれ以上の活性物質を含み、公知の方法または通常使用されている処方により製造される。

軟膏剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を基剤に研和、または溶融させて製造される。軟膏基剤は公知あるいは通常使用されているものから選ばれる。例えば、高級脂肪酸または高級脂肪酸エステル（アジピン酸、ミリスチン酸、パルミチン酸、ステアリン酸、オレイン酸、アジピン酸エステル、ミリスチン酸エステル、パルミチン酸エステル、ステアリン酸エステル、オレイン酸エステルなど）、ロウ類（ミツロウ、鯨ロウ、セレシンなど）、界面活性剤（ポリオキシエチレンアルキルエーテルリン酸エステルなど）、高級アルコール（セタノール、ステアリルアルコール、セトステアリルアルコールなど）、シリコン油（ジメチルポリシロキサンなど）、炭化水素類（親水ワセリン、白色ワセリン、精製ラノリン、流動パラフィンなど）、グリコール類（エチレングリコール、ジエチレングリコール、プロピレングリコール、ポリエチレングリコール、マクロゴールなど）、植物油（ヒマシ油、オリーブ油、ごま油、テレピン油など）、動物油（ミンク油、卵黄油、スクワラン、スクワレンなど）、水、吸収促進剤、かぶれ防止剤から選ばれるもの単独または2種以上を混合して用いられる。さらに、保湿剤、保存剤、安定化剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでいてもよい。

ゲル剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を基剤に溶融させて製造される。ゲル基剤

は公知あるいは通常使用されているものから選ばれる。例えば、低級アルコール（エタノール、イソプロピルアルコールなど）、ゲル化剤（カルボキシメチルセルロース、ヒドロキシエチルセルロース、ヒドロキシプロピルセルロース、エチルセルロースなど）、中和剤（トリエタノールアミン、ジイソプロパノールアミンなど）、界面活性剤（モノステアリン酸ポリエチレングリコールなど）、ガム類、水、吸収促進剤、かぶれ防止剤から選ばれるもの単独または2種以上を混合して用いられる。さらに、保存剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでいてもよい。

クリーム剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を基剤に溶解または乳化させて製造される。クリーム基剤は公知あるいは通常使用されているものから選ばれる。例えば、高級脂肪酸エステル、低級アルコール、炭化水素類、多価アルコール（プロピレングリコール、1,3-ブチレングリコールなど）、高級アルコール（2-ヘキシルデカノール、セタノールなど）、乳化剤（ポリオキシエチレンアルキルエーテル類、脂肪酸エステル類など）、水、吸収促進剤、かぶれ防止剤から選ばれるもの単独または2種以上を混合して用いられる。さらに、保存剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでいてもよい。

湿布剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を基剤に溶解させ、練合物とし支持体上に展延塗布して製造される。湿布基剤は公知あるいは通常使用されているものから選ばれる。例えば、増粘剤（ポリアクリル酸、ポリビニルピロリドン、アラビアゴム、デンプン、ゼラチン、メチルセルロースなど）、湿潤剤（尿素、グリセリン、プロピレングリコールなど）、充填剤（カオリン、酸化亜鉛、タルク、カルシウム、マグネシウムなど）、水、溶解補助剤、粘着付与剤、かぶれ防止剤から選ばれるもの単独または2種以上を混合して用いられる。さらに、保存剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでいてもよい。

貼付剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を基剤に溶融させ、支持体上に展延塗布して製造される。貼付剤用基剤は公知あるいは通常使用されているものから選ばれる。例えば、高分子基剤、油脂、高級脂肪酸、粘着付与剤、かぶれ防止剤から選ばれるもの単独または2種以上を混合して用いられる。さらに、保存剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでもよい。

リニメント剤は公知または通常使用されている処方により製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物を水、アルコール（エタノール、ポリエチレングリコールなど）、高級脂肪酸、グリセリン、セッケン、乳化剤、懸濁化剤などから選ばれるもの単独または2種以上に溶解、懸濁または乳化させて製造、調製される。さらに、保存剤、抗酸化剤、着香剤などを含んでもよい。

噴霧剤、吸入剤、スプレー剤および点鼻剤は、一般的に用いられる希釈剤以外に亜硫酸水素ナトリウムのような安定剤となど張性を与えるような緩衝剤、例えば塩化ナトリウム、クエン酸ナトリウムあるいはクエン酸のようななど張剤を含有していてもよい。スプレー剤の製造方法は、例えば米国特許第2,868,691号および同第3,095,355号に詳しく記載されている。

点鼻剤を投与する際には通常一般に薬剤を含有した溶液および粉末で、専用の点鼻器あるいは噴霧器を用い鼻腔内に定量的にスプレー（噴霧）投与される。

非経口投与のための点眼剤には、点眼液、懸濁型点眼液、乳濁型点眼液、用時溶解型点眼液および眼軟膏が含まれる。

これらの点眼剤は公知の方法に準じて製造される。例えば、ひとつまたはそれ以上の活性物質を溶剤に溶解、懸濁または乳化させて用いられる。点眼剤の溶剤としては、例えば、滅菌精製水、生理食塩水、その他の水性溶剤または注射用非水性用剤（例えば、植物油など）などおよびそれらの組み合わせ

せが用いられる。点眼剤は、など張化剤（塩化ナトリウム、濃グリセリンなど）、緩衝化剤（リン酸ナトリウム、酢酸ナトリウムなど）、界面活性化剤（ポリソルベート 80（商品名）、ステアリン酸ポリオキシシル 40、ポリオキシエチレン硬化ヒマシ油など）、安定化剤（クエン酸ナトリウム、エデト酸ナトリウムなど）、防腐剤（塩化ベンザルコニウム、パラベンなど）などを必要に応じて適宜選択して含んでいてもよい。これらは最終工程において滅菌するか、無菌操作法によって調製される。また無菌の固形剤、例えば凍結乾燥品を製造し、その使用前に無菌化または無菌の滅菌精製水または他の溶剤に溶解して使用することもできる。

- 10 非経口投与のための吸入剤としては、エアロゾル剤、吸入用粉末剤又は吸入用液剤が含まれ、当該吸入用液剤は用時に水又は他の適当な媒体に溶解又は懸濁させて使用する形態であってもよい。

これらの吸入剤は公知の方法に準じて製造される。

- 15 例えば、吸入用液剤の場合には、防腐剤（塩化ベンザルコニウム、パラベンなど）、着色剤、緩衝化剤（リン酸ナトリウム、酢酸ナトリウムなど）、など張化剤（塩化ナトリウム、濃グリセリンなど）、増粘剤（カリボキシビニルポリマーなど）、吸収促進剤などを必要に応じて適宜選択して調製される。

- 吸入用粉末剤の場合には、滑沢剤（ステアリン酸およびその塩など）、結合剤（デンプン、デキストリンなど）、賦形剤（乳糖、セルロースなど）、着色剤、防腐剤（塩化ベンザルコニウム、パラベンなど）、吸収促進剤などを必要に応じて適宜選択して調製される。

吸入用液剤を投与する際には通常噴霧器（アトマイザー、ネブライザー）が使用され、吸入用粉末剤を投与する際には通常粉末薬剤用吸入投与器が使用される。

- 25 非経口投与のためその他の組成物としては、ひとつまたはそれ以上の活性物質を含み、常法により処方される直腸内投与のための坐剤および腔内投与

のためのペッサリーなどが含まれる。

発明を実施するための最良の形態

以下、参考例および実施例によって本発明を詳述するが、本発明はこれら
5 に限定されるものではない。

また、本明細書に記載したすべての化合物は、IUPACが推奨する有機化学命名法に則り命名したか、またはACD/Name (バージョン 6.00, Advanced Chemistry Development Inc.社製) を用いて命名した。

クロマトグラフィーによる分離の箇所、TLCに示されているカッコ内の
10 溶媒は、使用した溶出溶媒または展開溶媒を示し、割合は体積比を表わす。
NMRの箇所に示されているカッコ内の溶媒は、測定に使用した溶媒を示している。MSは、特に記載していなければESI (エレクトロスプレーイオン) 法を用い、陽イオン (pos.) のみの検出を行なった。

なお、HPLC 条件は、以下の通りである。

15 (1) 条件A (分析)

使用機器: Waters LC/MS

カラム: Xterra (登録商標) MS C₁₈ 5 μm, 4.6×50 mm I.D.

流速: 3 mL/min

溶媒: A液: 0.1%トリフルオロ酢酸水溶液

20 B液: 0.1%トリフルオロ酢酸-アセトニトリル溶液

時間 (min.)	A液	B液
0	95	5
0.5	95	5
3	0	100
3.5	0	100
3.51	95	5
5	95	5

(2) 条件B (分析)

使用機器 : Waters LC/MS

カラム : Xterra (登録商標) MS C₁₈ 5 μ m, 4.6 \times 50 mm I.D.

流速 : 3 mL/min

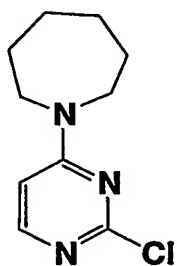
5 溶媒 : A液 : 0.1% トリエチルアミン水溶液

B液 : 0.1% トリエチルアミン-アセトニトリル溶液

時間 (min.)	A液	B液
0	95	5
0.5	95	5
3	0	100
3.5	0	100
3.51	95	5
7	95	5

参考例 1

10 2-クロロ-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン



2, 4-ジクロロピリミジン (3.0 g) のテトラヒドロフラン (50 mL) 溶液に氷冷下トリエチルアミン (4.2 mL) およびパーヒドロアゼピン (2.5 mL) を加え、混合物を室温で1時間反応した。反応混合物に水 (30 mL) を加え、濃縮した。残渣を塩化メチレンで3回抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥後濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (ヘキサン : 酢酸エチル = 5 : 1 \rightarrow 2 : 1) で精製

し、以下の物性値を有する標題化合物 (3.03 g) を得た。

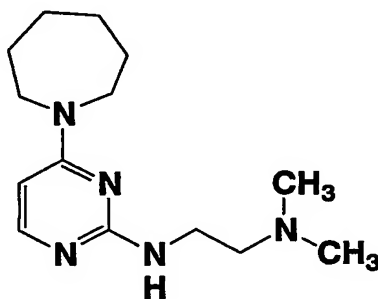
T L C : R f 0.18 (ヘキサン : 酢酸エチル = 3 : 1) ;

N M R (CDCl₃) : δ 1.53 (m, 4H), 1.78 (m, 4H), 3.44 (m, 2H), 3.83 (m, 2H), 6.29 (d, J = 6.32 Hz, 1H), 7.96 (d, J = 6.32 Hz, 1H)。

5

実施例 1

2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン



10 参考例 1 で製造した化合物 (1.5 g) と N, N - ジメチルエチレンジアミン (1.56 mL) を 90 °C で 16 時間攪拌した。反応液を冷却後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 10 : 1 : 0 → 10 : 1 : 0.2) で精製し、以下の物性値を有する標題化合物 (1.44 g) を得た。

15 結晶性粉末 : 融点 53.0-54.5 °C ;

T L C : R f 0.30 (クロロホルム : メタノール : 28 % アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

N M R (DMSO-d₆, 363.1 K) : δ 1.50 (m, 4H), 1.70 (m, 4H), 2.19 (s, 6H), 2.42 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.33 (q, J = 6.00 Hz, 2H), 3.56 (m, 4H), 5.74 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 6.00 Hz, 1H)。

20

実施例 1 (1) ~ 実施例 1 (47)

相当する化合物を用いて参考例 1→実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 1 (1)

5 2 - [3 - (イミダゾール-1-イル) プロピルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

TLC : Rf 0.66 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

10 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.49 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 1.97 (m, 2H), 3.24 (m, 2H), 3.54 (m, 4H), 4.01 (t, J = 7.00 Hz, 2H), 5.84 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.12 (m, 1H), 6.86 (d, J = 1.24 Hz, 1H), 7.10 (d, J = 1.24 Hz, 1H), 7.56 (s, 1H), 7.73 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 1 (2)

15 2 - (2-ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

TLC : Rf 0.57 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

20 NMR(DMSO-d₆, 363.1K) : δ 0.91 (d, J = 6.59 Hz, 3H), 1.50 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 2.20 (s, 6H), 2.72 (m, 1H), 3.20 (m, 2H), 3.55 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 5.67 (m, 1H), 5.83 (d, J = 5.77 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 5.77 Hz, 1H)。

実施例 1 (3)

4 - (2-ジメチルアミノエチルアミノ) - 2-ピロリジノピリミジン

25 TLC : Rf 0.29 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.84 (m, 4H), 2.17 (s, 6H), 2.38 (t, J = 6.73 Hz, 2H), 3.37 (m,

6H), 5.70 (d, J = 5.50 Hz, 1H), 6.77 (m, 1H), 7.64 (d, J = 5.50 Hz, 1H)。

実施例 1 (4)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (パーヒドロアゾシン - 1
5 - イル) ピリミジン

TLC : Rf 0.38 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1) ;

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.43 (m, 6H), 1.69 (m, 4H), 2.15 (s, 6H), 2.36 (t, J = 6.73 Hz,
2H), 3.32 (m, 2H), 3.58 (m, 4H), 5.68 (d, J = 5.50 Hz, 1H), 6.77 (m, 1H), 7.65 (d, J =
10 5.50 Hz, 1H)。

実施例 1 (5)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - ピペリジノピリミジン

TLC : Rf 0.44 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
15 10 : 1) ;

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 4H), 1.56 (m, 2H), 2.15 (s, 6H), 2.35 (t, J = 6.00 Hz,
2H), 3.33 (m, 2H), 3.63 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 5.70 (d, J = 5.77 Hz, 1H), 6.76 (s, 1H),
7.66 (d, J = 5.77 Hz, 1H)。

20 実施例 1 (6)

2 - (2 - ジメチルアミノ - 1 - メチルエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロ
アゼピン - 1 - イル) ピリミジン

TLC : Rf 0.52 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1) ;

25 NMR(CD₃OD) : δ 1.18 (d, J = 6.32 Hz, 3H), 1.55 (m, 4H), 1.76 (m, 4H), 2.28 (m,
7H), 2.51 (m, 1H), 3.58 (m, 4H), 4.15 (m, 1H), 5.90 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 7.67 (d, J =

6.04 Hz, 1H)。

実施例 1 (7)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - メチルピペラジン -
5 1 - イル) ピリミジン

NMR(DMSO- d_6) : δ 2.20 (s, 3H), 2.26 (s, 6H), 2.32 (m, 4H), 3.30 (m, 4H), 3.63 (m, 4H), 5.76 (d, J = 5.20 Hz, 1H), 6.91 (m, 1H), 7.69 (d, J = 5.20 Hz, 1H) ;

MS(m/z) : 265 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.83 ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 1 (8)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - フェニルピペラジン
- 1 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 327 (M + H)⁺ ;

15 HPLC 保持時間 (分) : 3.51 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (9)

2 - (4 - ベンジルピペラジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエ
チルアミノ) ピリミジン

20 MS(m/z) : 341 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.42 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (10)

2 - (4 - アセチルピペラジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエ
25 チルアミノ) ピリミジン

MS(m/z) : 293 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.78 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (1 1)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - ヒドロキシピペリジ
5 ン - 1 - イル) ピリミジン

MS (m/z) : 266 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.76 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (1 2)

10 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - メチルピペリジン -
 1 - イル) ピリミジン

MS (m/z) : 264 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.49 ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 1 (1 3)

 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (3 - メチルピペリジン -
 1 - イル) ピリミジン

MS (m/z) : 264 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.46 ; HPLC 条件 : B。

20

 実施例 1 (1 4)

 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (2 - メチルピペリジン -
 1 - イル) ピリミジン

MS (m/z) : 264 (M + H)⁺ ;

25 HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (15)

2 - (3 - ヒドロキシピロリジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノ
エチルアミノ) ピリミジン

MS(m/z) : 252 (M + H)⁺ ;

5 HPLC 保持時間 (分) : 2.70 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (16)

2 - (4 - エトキシカルボニルピペリジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチ
ルアミノエチルアミノ) ピリミジン

10 MS(m/z) : 322 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.31 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (17)

15 2 - (3 - エトキシカルボニルピペリジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチ
ルアミノエチルアミノ) ピリミジン

MS(m/z) : 322 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.33 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (18)

20 2 - チオモルホリノ - 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン

MS(m/z) : 268 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.18 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (19)

25 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - モルホリノピリミジン

MS(m/z) : 252 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.83 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (20)

2 - (4 - カルバモイルピペリジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン

MS (m/z) : 585 (2M + H)⁺, 293 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.72 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (21)

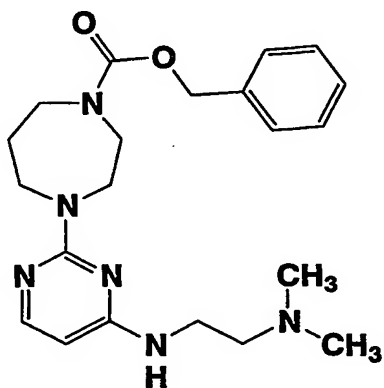
2 - (3 - カルバモイルピペリジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン

MS (m/z) : 293 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.78 ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 1 (22)

2 - (4 - ベンジルオキシカルボニル - 1, 4 - パーヒドロジアゼピン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン



MS (m/z) : 797 (2M + H)⁺, 399 (M + H)⁺ ;

20 HPLC 保持時間 (分) : 3.44 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (23)

2 - (4 - ベンジル - 1, 4 - パーヒドロジアゼピン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン

5 MS(m/z) : 355 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.47 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (24)

10 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (パーヒドロキノリン - 1 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 304 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.84 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (25)

15 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (パーヒドロイソキノリン - 2 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 304 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.86 ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 1 (26)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - メチル - 1, 4 - パーヒドロジアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 279 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.90 ; HPLC 条件 : B。

25

: 実施例 1 (27)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (4 - プロピルピペリジン
- 1 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 292 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.89 ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 1 (28)

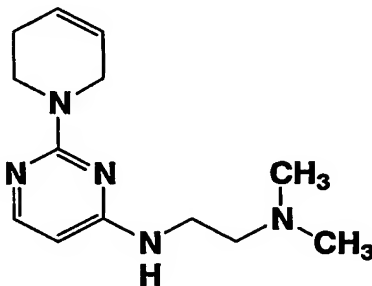
2 - (4 - ブチルピペラジン - 1 - イル) - 4 - (2 - ジメチルアミノエチ
ルアミノ) ピリミジン

MS(m/z) : 307 (M + H)⁺ ;

10 HPLC 保持時間 (分) : 3.34 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (29)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (1, 2, 3, 6 - テトラ
ヒドロピリジン - 1 - イル) ピリミジン



15

MS(m/z) : 248 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.25 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (30)

20 4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (3, 5 - ジメチルピペリ
ジン - 1 - イル) ピリミジン

MS(m/z) : 278 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.67 ; HPLC 条件 : B。

実施例 1 (3 1)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (パーヒドロアゼピン - 1
5 - イル) ピリミジン

T L C : R f 0.41 (クロロホルム : メタノール : 2 8 % アンモニア水 = 8 0 :
1 0 : 1) ;

N M R (DMSO- d_6) : δ 7.65 (brd, J = 5.7 Hz, 1H), 6.72 (br, 1H), 5.68 (d, J = 5.7 Hz,
1H), 3.61 (m, 4H), 3.30 (m, 2H), 2.36 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 2.15 (s, 6H), 1.65 (m, 4H),
10 1.44 (m, 4H)。

実施例 1 (3 2)

2 - (3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - ピロリジノピリミジン

T L C : R f 0.19 (クロロホルム : メタノール : 2 8 % アンモニア水 = 8 0 :
15 1 0 : 1) ;

N M R (DMSO- d_6) : δ 1.60 (m, 2H), 1.87 (m, 4H), 2.10 (s, 6H), 2.22 (t, J = 7.14 Hz,
2H), 3.20 (m, 2H), 3.38 (m, 4H), 5.66 (d, J = 5.77 Hz, 1H), 6.37 (m, 1H), 7.70 (d, J =
5.77 Hz, 1 H)。

20 実施例 1 (3 3)

2 - (3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノピリミジン

T L C : R f 0.28 (クロロホルム : メタノール : 2 8 % アンモニア水 = 8 0 :
1 0 : 1) ;

N M R (DMSO- d_6) : δ 1.46 (m, 4H), 1.60 (m, 4H), 2.11 (s, 6H), 2.22 (t, J = 7.14 Hz,
2H), 3.18 (m, 2H), 3.49 (m, 4H), 5.95 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.41 (m, 1H), 7.72 (d, J =
25 6.04 Hz, 1H)。

実施例 1 (34)

2 - (3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 TLC : R_f 0.19 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1);

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 4H), 1.61 (m, 6H), 2.09 (s, 6H), 2.21 (t, J = 7.14 Hz, 2H), 3.18 (q, J = 6.59 Hz, 2H), 3.51 (m, 4H), 5.81 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.41 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

10

実施例 1 (35)

2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 4 - ピロリジノピリミジン

TLC : R_f 0.20 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1);

15 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.87 (m, 4H), 2.15 (s, 6H), 2.36 (t, J = 6.73 Hz, 2H), 3.35 (m, 6H), 5.68 (d, J = 5.77 Hz, 1H), 6.14 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.77 Hz, 1H)。

実施例 1 (36)

2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 6 - メチル - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20

TLC : R_f 0.30 (クロロホルム : メタノール : トリエチルアミン = 80 : 10 : 1);

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.45 (m, 4H), 1.67 (m, 4H), 2.05 (s, 3H), 2.19 (s, 6H), 2.41 (t, J = 6.90 Hz, 2H), 3.29 (m, 2H), 3.65 (m, 4H), 5.73 (s, 1H), 6.15 (m, 1H)。

25

実施例 1 (37)

2-((2-ジメチルアミノエチルアミノ)-5-メチル-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

TLC: Rf 0.32 (クロロホルム:メタノール:トリエチルアミン=80:10:1);

5 NMR(DMSO-d₆): δ 1.47 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 2.08 (s, 3H), 2.14 (s, 6H), 2.34 (t, J = 6.60 Hz, 2H), 3.25 (td, J = 6.60, 6.00 Hz, 2H), 3.60 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 6.00 (m, 1H), 7.52 (s, 1H)。

実施例 1 (38)

10 2-((1-ベンジルピペリジン-4-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

TLC: Rf 0.52 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

15 NMR(DMSO-d₆, 363.1K): δ 1.49 (m, 6H), 1.68 (m, 4H), 1.87 (m, 2H), 2.07 (td, J = 11.47, 2.61 Hz, 2H), 2.77 (m, 2H), 3.46 (s, 2H), 3.54 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.66 (m, 1H), 5.74 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 7.25 (m, 5H), 7.72 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 1 (39)

20 2-((2-モルホリノエチルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

TLC: Rf 0.41 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.45 (m, 4H), 1.68 (m, 4H), 2.38 (m, 6H), 3.30 (q, J = 6.00 Hz, 2H), 3.57 (m, 8H), 5.83 (d, J = 5.70 Hz, 1H), 6.19 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.70 Hz, 1H)。

実施例 1 (40)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- (2-ピロリジノエチルアミノ) ピリミジン

5 TLC: Rf 0.23 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:1);

NMR(DMSO-d₆, 363.1K): δ 1.51 (m, 4H), 1.74 (m, 8H), 2.69 (m, 4H), 2.75 (t, J = 6.60 Hz, 2H), 3.42 (m, 2H), 3.56 (m, 4H), 5.86 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 5.99 (m, 1H), 7.73 (d, J = 6.00 Hz, 1H)。

10 実施例 1 (41)

2- (2-アミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン・二塩酸塩

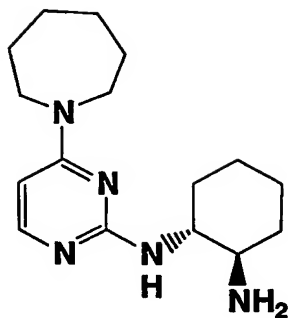
結晶性粉末: 融点 100-102°C;

15 TLC: Rf 0.16 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:1);

NMR(CD₃OD): δ 1.61 (m, 4H), 1.85 (m, 4H), 3.22 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.70 (m, 2H), 3.75 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.93 (m, 2H), 6.44 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 7.70 Hz, 1H)。

20 実施例 1 (42)

(±) -2- [(1R*, 2R*) -2-アミノシクロヘキシルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

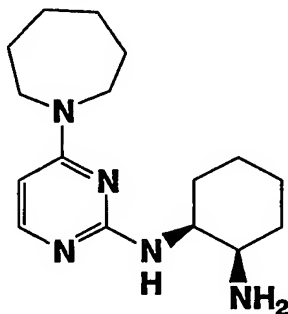


TLC: Rf 0.23 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

NMR(DMSO-d₆): δ 1.11 (m, 4H), 1.45 (m, 4H), 1.62 (m, 6H), 1.81 (m, 1H), 1.97 (m, 1H), 3.37 (m, 6H), 5.82 (d, J = 5.80 Hz, 1H), 6.19 (m, 1H), 7.70 (d, J = 5.80 Hz, 1H)。

実施例 1 (43)

(±)-2-[(1S*, 2R*)-2-アミノシクロヘキシルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン



TLC: Rf 0.19 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

NMR(DMSO-d₆): δ 1.25 (m, 2H), 1.47 (m, 10H), 1.68 (m, 4H), 2.96 (m, 1H), 3.37 (m, 4H), 3.73 (m, 1H), 5.83 (d, J = 5.80 Hz, 1H), 5.91 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.80 Hz, 1H)。

実施例 1 (44)

2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロキノリン - 1 - イル) ピリミジン

5 TLC : Rf 0.50 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

NMR(DMSO-d₆, 373.1K) : δ 1.37 (m, 6H), 1.60 (m, 2H), 1.80 (m, 5H), 2.62 (s, 6H), 2.84 (m, 1H), 2.98 (m, 2H), 3.54 (m, 2H), 4.16 (m, 1H), 4.36 (m, 1H), 6.08 (d, J = 6.32 Hz, 1H), 6.74 (m, 1H), 7.77 (d, J = 6.32 Hz, 1H)。

10 実施例 1 (45)

4 - (4 - アセチルピペラジン - 1 - イル) - 2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) ピリミジン

TLC : Rf 0.40 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1)

15 NMR(DMSO-d₆) : δ 2.02 (s, 3H), 2.54 (s, 6H), 2.87 (t, J = 6.32 Hz, 2H), 3.40 (m, 10H), 6.09 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.64 (m, 1H), 7.83 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 1 (46)

20 2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 4 - (3 - メチルピペリジン - 1 - イル) ピリミジン

TLC : Rf 0.50 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

25 NMR(DMSO-d₆) : δ 0.86 (d, J = 6.60 Hz, 3H), 1.14 (m, 1H), 1.34 (m, 1H), 1.48 (m, 1H), 1.62 (m, 1H), 1.78 (m, 1H), 2.14 (s, 6H), 2.34 (t, J = 6.90 Hz, 2H), 2.44 (m, 1H), 2.76 (m, 1H), 3.27 (m, 2H), 4.16 (m, 2H), 5.98 (d, J = 5.80 Hz, 1H), 6.20 (m, 1H), 7.73 (d, J = 5.80 Hz, 1H)。

実施例 1 (47)

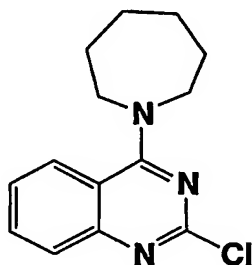
2-(2-アミノエチルアミノ)-5-ブロモ-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン・二塩酸塩

- 5 TLC: R_f 0.60 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

NMR(CD₃OD): δ 1.65 (m, 4H), 1.90 (m, 4H), 3.21 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.73 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 4.11 (m, 4H), 8.06 (s, 1H)。

10 参考例 2

2-クロロ-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)キナゾリン



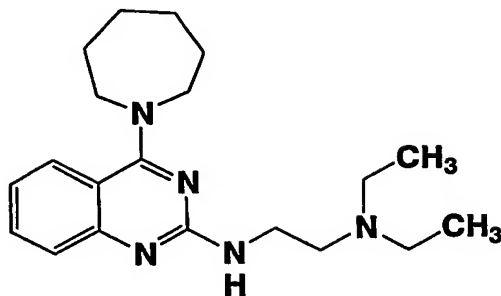
- 2, 4-ジクロロキナゾリン (1.0 g) のテトラヒドロフラン (10 mL) 溶液に氷冷下トリエチルアミン (2.1 mL) およびパーヒドロアゼピン (0.745 mL) を加え、混合物を室温で1時間攪拌した。反応混合物に水 (20 mL) を加え、濃縮した。残渣を塩化メチレンで3回抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥後、濃縮した。残渣をヘキサン-ジエチルエーテル混合溶媒 (10:1) で洗浄し、以下の物性値を有する標題化合物 (991 mg) を得た。

- 20 TLC: R_f 0.31 (ヘキサン:酢酸エチル=3:1); MS(m/z): 264, 262 (M+H)⁺;

HPLC 保持時間 (分) 3.34; HPLC 条件: A。

実施例 2

2- (2-ジエチルアミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン



5

参考例 2 で製造した化合物 (300 mg) の 2-プロパノール (3 mL) 溶液に N,N-ジエチルエチレンジアミン (0.49 mL) を加え、混合物を 80 °C で 16 時間攪拌した。反応混合物を冷却し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 10 : 1 : 0 → 10 : 1 : 0.3) で精製し、以下の物性値を有する本発明化合物 (267 mg) を得た。

10

TLC : R_f 0.43 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

NMR(CDCl₃) : δ 7.80 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.45 (m, 2H), 6.98 (m, 1H), 5.26 (br, 1H), 3.87 (m, 4H), 3.53 (m, 2H), 2.66 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.58 (q, J = 6.9 Hz, 4H), 1.97 (m, 4H), 1.66 (m, 4H), 1.04 (t, J = 6.9 Hz, 6H) ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺, 171 ;

15

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 min. ; HPLC 条件 : A。

20 実施例 2 (1) ~ 実施例 2 (95)

相当する化合物を用いて、参考例 2 → 実施例 2 で示される方法と同様に操作して、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 2 (1)

2 - [2 - [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] エチルアミノ]
- 4-ピロリジノキナゾリン

- 5 HPLC 保持時間 (分) : 2.78 ; MS(m/z) : 346 (M + H)⁺, 242 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (2)

- 10 2 - [3 - (イミダゾール-1-イル) プロピルアミノ] - 4-ピロリジノ
キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS(m/z) : 323 (M + H)⁺, 215 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (3)

- 15 2 - (2-モルホリノエチルアミノ) - 4-ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.77 ; MS(m/z) : 328 (M + H)⁺, 242 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (4)

- 20 2 - [3 - (2-メチルピペリジン-1-イル) プロピルアミノ] - 4-ピ
ロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; MS(m/z) : 354 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (5)

- 25 2 - [2 - [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] エチルアミノ]
- 4-ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.87 ; MS (m/z) : 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (6)

- 5 2 - [3 - (イミダゾール - 1 - イル) プロピルアミノ] - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.01 ; MS (m/z) : 337 (M + H)⁺, 229 ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 2 (7)

2 - (2 - モルホリノエチルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.90 ; MS (m/z) : 342 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (8)

- 15 2 - (3 - ピロリジノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; MS (m/z) : 340 (M + H)⁺, 229 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (9)

- 20 2 - [2 - (1 - メチルピロリジン - 2 - イル) エチルアミノ] - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; MS (m/z) : 340 (M + H)⁺, 170.5 ; HPLC 条件 : A。

25 実施例 2 (10)

2 - (1 - エチルピロリジン - 2 - イルメチルアミノ) - 4 - ピペリジノキ

ナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS(m/z) : 340 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (11)

- 5 2 - (2, 2 - ジメチル - 3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.00 ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (12)

- 10 2 - (2 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.94 ; MS(m/z) : 314 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (13)

2 - (2 - ジエチルアミノエチルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

- 15 HPLC 保持時間 (分) : 2.94 ; MS(m/z) : 328 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (14)

2 - (3 - ジエチルアミノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

- 20 HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺, 314, 229 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (15)

2 - (3 - モルホリノプロピルアミノ) - 4 - ピペリジノキナゾリン

- 25 HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS(m/z) : 356 (M + H)⁺, 178.5 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (16)

2- [3- [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] プロピルアミノ] -4-ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ; MS (m/z) : 374 (M + H)⁺, 356, 314 ; HPLC 条件 : A。
5

実施例 2 (17)

2- (3-ジメチルアミノプロピルアミノ) -4-ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS (m/z) : 314 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。
10

実施例 2 (18)

2- (2-ジメチルアミノ-1-メチルエチルアミノ) -4-ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ; MS (m/z) : 314 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。
15

実施例 2 (19)

2- [3- (2-メチルピペリジン-1-イル) プロピルアミノ] -4-ピペリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; MS (m/z) : 368 (M + H)⁺, 229 ; HPLC 条件 : A。
20

実施例 2 (20)

2- [2- [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.90 ; MS (m/z) : 747 (2M + H)⁺, 374 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。
25

実施例 2 (21)

2- [3- (イミダゾール-1-イル) プロピルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

5 HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; MS(m/z) : 351 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (22)

2- (2-モルホリノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

10 HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS(m/z) : 711 (2M+H)⁺, 356 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (23)

2- (3-ピロリジノプロピルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

15 HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; MS(m/z) : 354 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (24)

2- [2- (1-メチルピロリジン-2-イル) エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

20 HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; MS(m/z) : 707 (2M+H)⁺, 354 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (25)

25 2- (1-エチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; MS(m/z) : 354 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (26)

2 - (2, 2-ジメチル-3-ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン
5

HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; MS(m/z) : 711 (2M + H)⁺, 356 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (27)

10 2 - (2-ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.01 ; MS(m/z) : 328 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (28)

15 2 - (3-ジエチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; MS(m/z) : 356 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (29)

20 2 - (3-モルホリノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.00 ; MS(m/z) : 370 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (30)

25 2 - [3 - [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] プロピルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; MS(m/z) : 388(M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (3 1)

2 - (2 - ジメチルアミノ - 1 - メチルエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロ
5 アゼピン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; MS(m/z) : 328 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (3 2)

2 - [3 - (2 - メチルピペリジン - 1 - イル) プロピルアミノ] - 4 - (パ
10 - ヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS(m/z) : 382 (M + H)⁺, 243 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (3 3)

15 2 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 4 - ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.83 ; MS(m/z) : 286 (M + H)⁺, 241 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (3 4)

20 2 - (2 - ピロリジノエチルアミノ) - 4 - ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS(m/z) : 312 (M + H)⁺, 241 ; HPLC 条件 :
A。

実施例 2 (3 5)

25 2 - (3 - ピロリジノプロピルアミノ) - 4 - ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 326 (M + H)⁺, 215 ; HPLC 条件 :

A。

実施例 2 (36)

2- (2-ピペリジノエチルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン

5 HPLC 保持時間 (分) : 2.90 ; MS(m/z) : 326 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (37)

2- (2- (1-メチルピロリジン-2-イル) エチルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン

10 HPLC 保持時間 (分) : 2.90 ; MS(m/z) : 651 (2M + H)⁺, 326 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (38)

2- (1-エチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン

15

HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 326 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (39)

2- (2, 2-ジメチル-3-ジメチルアミノプロピルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン

20

HPLC 保持時間 (分) : 2.94 ; MS(m/z) : 328 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (40)

2- (2-ジメチルアミノプロピルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン

25 HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 300 (M + H)⁺, 150.5 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (41)

2-(2-ジエチルアミノエチルアミノ)-4-ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 314 (M+H)⁺, 241 ; HPLC 条件 :

5 A。

実施例 2 (42)

2-(3-ジエチルアミノプロピルアミノ)-4-ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ; MS(m/z) : 328 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

10

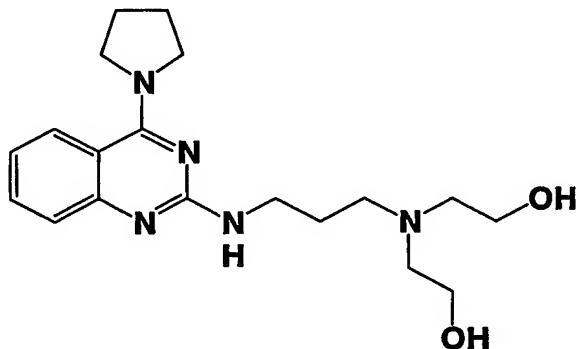
実施例 2 (43)

2-(3-モルホリノプロピルアミノ)-4-ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 342 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

15 実施例 2 (44)

2-[3-[N,N-ビス(2-ヒドロキシエチル)アミノ]プロピルアミノ]-4-ピロリジノキナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 360 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 2 (45)

2- (3-ジメチルアミノプロピルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン
HPLC 保持時間 (分) : 2.89 ; MS(m/z) : 300 (M + H)⁺, 255 ; HPLC 条件 : A。

5 実施例 2 (46)

2- (2-ジメチルアミノ-1-メチルエチルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン
HPLC 保持時間 (分) : 2.87 ; MS(m/z) : 300 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 2 (47)

2- (1-メチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4-ピロリジノキナゾリン
HPLC 保持時間 (分) : 2.91 ; MS(m/z) : 312 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

15 実施例 2 (48)

2- [2- [N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) アミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン
HPLC 保持時間 (分) : 3.00 ; MS(m/z) : 775 (2M + H)⁺, 388 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 2 (49)

2- (2-ピロリジノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン
HPLC 保持時間 (分) : 3.02 ; MS(m/z) : 354 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

25

実施例 2 (50)

2- (3-イミダゾール-1-イルプロピルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.07; MS (m/z): 729 (2M + H)⁺, 365 (M + H)⁺; HPLC 条件: A。

5

実施例 2 (5 1)

2- (2-モルホリノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.01; MS (m/z): 739 (2M + H)⁺, 370 (M + H)⁺; HPLC

10 条件: A。

実施例 2 (5 2)

2- (3-ピロリジノプロピルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

15 HPLC 保持時間 (分): 3.11; MS (m/z): 368 (M + H)⁺, 184.5; HPLC 条件: A。

実施例 2 (5 3)

2- (2-ピペリジノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

20

HPLC 保持時間 (分): 3.07; MS (m/z): 368 (M + H)⁺, 184.5; HPLC 条件: A。

実施例 2 (5 4)

25 2- [2- (1-メチルピロリジン-2-イル) エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; MS (m/z) : 735 (2M + H)⁺, 368 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (55)

- 5 2 - (1 - エチルピロリジン - 2 - イルメチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゾシン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; MS (m/z) : 368 (M + H)⁺, 207 ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 2 (56)

- 2 - (3 - ジメチルアミノ - 2, 2 - ジメチルプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゾシン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS (m/z) : 370 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

15 実施例 2 (57)

- 2 - (2 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゾシン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.07 ; MS (m/z) : 342 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

20 実施例 2 (58)

- 2 - (2 - ジエチルアミノエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゾシン - 1 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; MS (m/z) : 356 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

25 実施例 2 (59)

- 2 - (3 - ジエチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゾシン -

1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS(m/z) : 370 (M + H)⁺, 185.5 ; HPLC 条件 : A。

5 実施例 2 (60)

2-(3-モルホリノプロピルアミノ)-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.07 ; MS(m/z) : 384 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 2 (61)

2-[3-[N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル)アミノ]プロピルアミノ]-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; MS(m/z) : 402 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

15 実施例 2 (62)

2-(3-ジメチルアミノプロピルアミノ)-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.07 ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺, 297 ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 2 (63)

2-(2-ジメチルアミノ-1-メチルエチルアミノ)-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.02 ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

25

実施例 2 (64)

2-[3-(2-メチルピペリジン-1-イル) プロピルアミノ]-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.14; MS(m/z): 396 (M + H)⁺, 198.5; HPLC 条件: A。

5

実施例 2 (65)

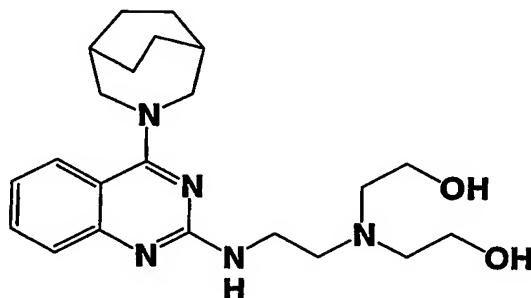
2-(1-メチルピロリジン-2-イルメチルアミノ)-4-(パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.07; MS(m/z): 354 (M + H)⁺; HPLC 条件: A。

10

実施例 2 (66)

2-[2-[N, N-ビス(2-ヒドロキシエチル) アミノ] エチルアミノ]-4-(3-アザビシクロ[3.2.2]ノナン-3-イル) キナゾリン



15 HPLC 保持時間 (分): 3.01; MS(m/z): 799 (2M + H)⁺, 400 (M + H)⁺; HPLC 条件: A。

実施例 2 (67)

2-(2-ピロリジノエチルアミノ)-4-(3-アザビシクロ[3.2.2]ノナン-3-イル) キナゾリン

20 HPLC 保持時間 (分): 3.09; MS(m/z): 366 (M + H)⁺, 207; HPLC 条件: A。

実施例 2 (68)

2-[3-(イミダゾール-1-イルアミノ)プロピル]-4-(3-アザ
ピシクロ[3.2.2]ノナン-3-イル)キナゾリン

- 5 HPLC 保持時間(分):3.11; MS(m/z):753 (2M+H)⁺, 377 (M+H)⁺; HPLC
条件: A。

実施例 2 (69)

- 2-(2-モルホリノエチルアミノ)-4-(3-アザピシクロ[3.2.
10 2]ノナン-3-イル)キナゾリン

HPLC 保持時間(分):3.05; MS(m/z):763(2M+H)⁺, 382 (M+H)⁺; HPLC
条件: A。

実施例 2 (70)

- 15 2-(3-ピロリジノプロピルアミノ)-4-(3-アザピシクロ[3.2.
2]ノナン-3-イル)キナゾリン

HPLC 保持時間(分):3.11; MS(m/z):380 (M+H)⁺, 190.5; HPLC 条件:
A。

20 実施例 2 (71)

2-(2-ピペリジノエチルアミノ)-4-(3-アザピシクロ[3.2.
2]ノナン-3-イル)キナゾリン

HPLC 保持時間(分):3.11; MS(m/z):380 (M+H)⁺; HPLC 条件: A。

25 実施例 2 (72)

2-[2-(1-メチルピロリジン-2-イル)エチルアミノ]-4-(3

ーアザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS(m/z) : 380 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (7 3)

- 5 2- (1-エチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; MS(m/z) : 380 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (7 4)

- 10 2- [3-ジメチルアミノ-2, 2-ジメチルプロピルアミノ] -4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.14 ; MS(m/z) : 382 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (7 5)

- 15 2- (2-ジメチルアミノプロピルアミノ) -4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; MS(m/z) : 354 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (7 6)

- 20 2- (2-ジエチルアミノエチルアミノ) -4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.06 ; MS(m/z) : 368 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (7 7)

- 25 2- (3-ジエチルアミノプロピルアミノ) -4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン-3-イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.14 ; MS (m/z) : 382 (M + H)⁺, 191.5 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (78)

- 5 2 - (3 - モルホリノプロピルアミノ) - 4 - (3 - アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン - 3 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.08 ; MS (m/z) : 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 2 (79)

2 - [3 - [N, N - ビス (2 - ヒドロキシエチル) アミノ] プロピルアミノ] - 4 - (3 - アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン - 3 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; MS (m/z) : 414 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

15

実施例 2 (80)

2 - (3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (3 - アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン - 3 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; MS (m/z) : 354 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 2 (81)

2 - (2 - ジメチルアミノ - 1 - メチルエチルアミノ) - 4 - (3 - アザビシクロ [3. 2. 2] ノナン - 3 - イル) キナゾリン

HPLC 保持時間 (分) : 3.07 ; MS (m/z) : 354 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : A。

25

実施例 2 (82)

2-[3-(2-メチルピペリジン-1-イル)プロピルアミノ]-4-(3-アザビシクロ[3.2.2]ノナン-3-イル)キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.18; MS(m/z): 408 (M+H)⁺; HPLC 条件: A。

5 実施例 2 (83)

2-(1-メチルピロリジン-2-イルメチルアミノ)-4-(3-アザビシクロ[3.2.2]ノナン-3-イル)キナゾリン

HPLC 保持時間 (分): 3.09; MS(m/z): 731 (2M+H)⁺, 366 (M+H)⁺; HPLC 条件: A。

10

実施例 2 (84)

2-(2-ジメチルアミノエチルアミノ)-4-ピペリジノキナゾリン

MS(m/z): 300 (M+H)⁺;

HPLC 保持時間 (分): 3.83; HPLC 条件: B。

15

実施例 2 (85)

2-(2-ピロリジノエチルアミノ)-4-ピペリジノキナゾリン

NMR(DMSO-d₆): δ 7.66 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.48 (m, 1H), 7.30 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.04 (t, J = 7.2 Hz, 1H), 6.51 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.43 (m, 2H), 3.25 (m, 2H), 3.15 (m, 2H), 2.57 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 1.66 (m, 10H);

20

MS(m/z): 326 (M+H)⁺, 283;

HPLC 保持時間 (分): 4.16; HPLC 条件: B。

実施例 2 (86)

25 2-(2-ピペリジノエチルアミノ)-4-ピペリジノキナゾリン

NMR(DMSO-d₆): δ 7.66 (dd, J = 8.4, 0.9 Hz, 1H), 7.49 (m, 1H), 7.30 (d, J = 8.1

Hz, 1H), 7.04 (t, J = 7.2 Hz, 1H), 6.45 (m, 1H), 3.40 (m, 4H), 3.43 (m, 2H), 2.45 (t, J = 7.2 Hz, 2H), 2.37 (m, 4H), 1.66 (m, 6H), 1.49 (m, 4H), 1.38 (m, 2H) ;

MS (m/z) : 340 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 4.16 ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 2 (8 7)

2 - (2 - ピロリジノエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

10 NMR(DMSO-d₆) : δ 7.81 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.25 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.96 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 6.29 (m, 1H), 3.81 (m, 4H), 3.39 (m, 2H), 2.56 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 2.37 (m, 4H), 1.86 (m, 4H), 1.67 (m, 4H), 1.56 (m, 4H) ;

MS (m/z) : 340 (M + H)⁺, 215 ;

HPLC 保持時間 (分) : 4.41 ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 2 (8 8)

2 - (2 - ピペリジノエチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

20 NMR(DMSO-d₆) : δ 7.81 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.25 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.92 (t, J = 8.4 Hz, 1H), 6.23 (m, 1H), 3.86 (m, 4H), 3.38 (m, 2H), 2.43 (m, 2H), 2.36 (m, 4H), 1.86 (m, 4H), 1.56 (m, 4H), 1.48 (m, 4H), 1.37 (m, 2H) ;

MS (m/z) : 354 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.96 ; HPLC 条件 : B。

実施例 2 (8 9)

25 2 - (3 - ジメチルアミノプロピルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

NMR(DMSO-d₆) : δ 7.80 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.48 (m, 1H), 7.24 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.95 (t, J = 7.5 Hz, 1H), 6.49 (m, 1H), 3.80 (m, 4H), 3.30 (m, 2H), 2.24 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 2.11 (s, 6H), 1.86 (m, 4H), 1.62 (m, 2H), 1.56 (m, 4H) ;

MS (m/z) : 328 (M + H)⁺ ;

5 HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; HPLC 条件 : A。

実施例 2 (9 0)

2 - (4 - ジメチルアミノブチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

10 NMR(DMSO-d₆) : δ 7.81 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.44 (t, J = 8.1 Hz, 1H), 7.24 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 6.96 (t, J = 8.1 Hz, 1H), 6.57 (m, 1H), 3.81 (m, 4H), 3.30 (m, 2H), 2.37 (m, 2H), 2.21 (s, 6H), 1.86 (m, 4H), 1.56 (m, 4H), 1.50 (m, 4H) ;

MS (m/z) : 342 (M + H)⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.00 ; HPLC 条件 : A。

15

実施例 2 (9 1)

4 - (2 - ジメチルアミノエチルアミノ) - 2 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) キナゾリン

20 TLC : R_f 0.31 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

NMR(DMSO-d₆) : δ 7.89 (d, J = 6.9 Hz, 1H), 7.83 (t, J = 6.3 Hz, 1H), 7.43 (dd, J = 8.4, 6.9 Hz, 1H), 7.21 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 6.98 (dd, J = 8.4, 7.8 Hz, 1H), 3.74 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 3.57 (dt, J = 6.3, 6.3 Hz, 2H), 2.54 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.22 (s, 6H), 1.71 (m, 4H), 1.46 (m, 4H)。

25

実施例 2 (9 2)

2- (2-アミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

TLC: Rf 0.14 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水= 80 : 10 : 1);

5 NMR(DMSO-d₆): δ 7.81 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.43 (dd, J = 8.4, 7.2 Hz, 1H), 7.25 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 6.96 (dd, J = 8.4, 7.2 Hz, 1H), 6.46 (br, 1H), 3.79 (m, 4H), 3.29 (m, 2H), 2.69 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 1.85 (m, 4H), 1.56 (m, 4H)。

実施例2 (93)

10 2- (2-ジメチルアミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゾシン-1-イル) キナゾリン

TLC: Rf 0.31 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水= 80 : 10 : 1);

15 NMR(DMSO-d₆): δ 1.61 (m, 6H), 1.90 (m, 4H), 2.60 (s, 6H), 2.98 (t, J = 6.18 Hz, 2H), 3.65 (t, J = 6.18 Hz, 2H), 3.94 (m, 4H), 7.17 (m, 1H), 7.42 (m, 1H), 7.57 (m, 1H), 7.96 (d, J = 8.24 Hz, 1H)。

実施例2 (94)

20 4- (3-アザビシクロ [3.2.2] ノナン-3-イル) -2- (2-ジメチルアミノエチルアミノ) キナゾリン

TLC: Rf 0.34 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水= 80 : 10 : 1);

25 NMR(DMSO-d₆): δ 2.01 (m, 10H), 2.56 (s, 6H), 2.77 (t, J = 6.73 Hz, 2H), 3.74 (m, 2H), 4.17 (m, 4H), 6.71 (m, 1H), 7.37 (t, J = 8.1 Hz, 1H), 7.65 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.83 (t, J = 8.1 Hz, 1H), 8.09 (d, J = 8.10 Hz, 1H)。

実施例 2 (95)

2- (2-ジメチルアミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) キナゾリン

5 TLC: Rf 0.45 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1);

NMR(DMSO-d₆): δ 1.56 (m, 4H), 1.85 (m, 4H), 2.16 (s, 6H), 2.39 (t, J = 6.87 Hz, 2H), 3.37 (m, 2H), 3.80 (m, 4H), 6.23 (m, 1H), 6.96 (m, 1H), 7.25 (d, J = 8.24 Hz, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.81 (d, J = 8.52 Hz, 1H)。

10 参考例 3

2- [1- (ト-ブトキシカルボニル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 N, N-ジメチルエチレンジアミンの代わりに 1- (ト-ブトキシカルボニル) ピロリジン-2-イルメチルアミンを用いて実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する標題化合物を得た。

TLC: Rf 0.45 (クロロホルム: メタノール = 9 : 1);

NMR(CDCl₃): δ 7.65 (m, 1H), 5.81 (d, J = 6.3 Hz, 1H), 4.01 (m, 1H), 3.52 (m, 8H), 1.89 (m, 4H), 1.75 (m, 4H), 1.55 (m, 4H), 1.46 (s, 9H);

MS(m/z): 376 (M + H)⁺。

20

実施例 3

2- (ピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 参考例 3 で製造した化合物 (1.06 g) に氷冷下 95%トリフルオロ酢酸水溶液 (20 mL) を加え、混合物を 0℃で 2 時間攪拌した。反応混合物を濃縮し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (クロロホルム: メタノー

ル＝9：1→クロロホルム：メタノール：28％アンモニア水＝80：10：

1)で精製し、以下の物性値を有する本発明化合物(0.72g)を得た。

TLC: Rf 0.08 (クロロホルム：メタノール：28％アンモニア水＝80：10：1)；

5 NMR(CDCl₃): δ 1.48 (m, 6H), 1.73 (m, 4H), 2.07 (m, 2H), 2.76 (m, 2H), 3.02 (m, 2H), 3.14 (m, 2H), 3.55 (m, 3H), 3.89 (m, 1H), 4.84 (d, J = 6.30 Hz, 1H), 5.78 (d, J = 6.30 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 6.30 Hz, 1H)；

MS (FAB, Pos., Glycerin + m-NBA) (m/z): 276 (M + H)⁺。

10 実施例4

2-(1-ベンジルピロリジン-3-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

参考例1で製造した化合物(4.00g)と1-ベンジル-3-アミノピロリジン(4.33g)を90℃で16時間攪拌した。反応混合物を冷却後、シリカゲル
15 カラムクロマトグラフィー(酢酸エチル：ヘキサン＝1：2→クロロホルム：メタノール：28％アンモニア水＝80：10：0.6)で精製し、以下の物性値を有する標題化合物(4.85g)を得た。

TLC: Rf 0.45 (クロロホルム：メタノール：28％アンモニア水＝80：10：1)；

20 NMR(DMSO-d₆): δ 1.50 (m, 4H), 1.74 (m, 5H), 2.21 (m, 1H), 2.60 (dd, J = 9.89, 5.22 Hz, 1H), 2.70 (m, 1H), 2.83 (m, 1H), 3.00 (dd, J = 9.89, 6.87 Hz, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.78 (s, 2H), 4.33 (m, 1H), 5.93 (d, J = 6.32 Hz, 1H), 6.35 (m, 1H), 7.31 (m, 5H), 7.73 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

25 実施例5

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-(ピロリジン-3-イルアミ

ノ) ピリミジン

実施例 4 で製造した化合物 (4.5 g) のエタノール (150 mL) 溶液にアルゴン雰囲気下水酸化パラジウム (0.97 g) を加え、水素雰囲気下この混合物を 75°C で 4 時間攪拌した。反応混合物を冷却し、ろ過後ろ液を濃縮した。

- 5 残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (塩化メチレン: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:0.5→80:10:1) で精製し、以下の物性値を有する本発明化合物 (2.96 g) を得た。

TLC: Rf 0.15 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:1);

- 10 NMR(DMSO-d₆): δ 1.45 (m, 4H), 1.62 (m, 6H), 1.93 (m, 1H), 2.66 (dd, J = 11.26, 4.40 Hz, 1H), 2.76 (m, 1H), 2.94 (m, 2H), 3.59 (m, 4H), 4.16 (m, 1H), 5.85 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.42 (m, 1H), 7.72 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

参考例 4

- 15 2-(1-ベンジルオキシカルボニルピペリジン-3-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

参考例 1 で製造した化合物 (5.74 g) および 1-ベンジルオキシカルボニル-3-アミノピペリジン (6.35 g) の混合物を 90°C で 16 時間攪拌した。反応混合物を冷却後、シリカゲルカラムクロマトグラフィー (酢酸エチル: ヘ

- 20 キサン=1:2→クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:0.5) で精製し、以下の物性値を有する標題化合物 (3.40 g) を得た。

TLC: Rf 0.68 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水=80:10:1)

- 25 NMR(CDCl₃): δ 1.40 (m, 2H), 1.55 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 2.05 (m, 2H), 3.05 (m, 2H), 3.55 (m, 4H), 3.91 (m, 1H), 4.12 (m, 2H), 4.73 (m, 1H), 5.13 (s, 2H), 5.80 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.34 (m, 5H), 7.80 (d, J = 6.00 Hz, 1H)。

実施例 6

2-（ピペリジン-3-イルアミノ）-4-（パーヒドロアゼピン-1-イル）ピリミジン

- 5 アルゴン雰囲気下、参考例 4 で製造した化合物（5.06 g）のメタノール（150 mL）溶液にパラジウム-炭素（1.0 g）を加え、水素雰囲気下混合物を室温で 4 時間攪拌した。反応混合物をろ過し、ろ液を濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（塩化メチレン：メタノール：28%アンモニア水=80：10：0.5→80：10：1）で精製し、以下の物性値を有する本発明化合物（3.02 g）を得た。

TLC：Rf 0.18（クロロホルム：メタノール：28%アンモニア水=80：10：1）；

- 15 NMR(CDCl₃): δ 1.48 (m, 6H), 1.73 (m, 4H), 2.07 (m, 2H), 2.76 (m, 2H), 3.02 (m, 2H), 3.14 (m, 2H), 3.55 (m, 3H), 3.89 (m, 1H), 4.84 (d, J = 6.30 Hz, 1H), 5.78 (d, J = 6.30 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 6.30 Hz, 1H)。

実施例 6 (1)

4-（パーヒドロアゼピン-1-イル）-2-（ピペリジン-4-イルアミノ）ピリミジン

- 20 相当する化合物を用いて、実施例 6 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

TLC：Rf 0.15（クロロホルム：メタノール：28%アンモニア水=80：10：1）；

- 25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.27 (m, 2H), 1.45 (m, 4H), 1.65 (m, 4H), 1.76 (m, 2H), 2.47 (m, 2H), 2.92 (m, 2H), 3.63 (m, 5H), 5.81 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.19 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 7

2- [1- (3-メチルブチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 5 実施例 3 で製造した化合物 (200 mg) の 1% 酢酸-N, N-ジメチルホルムアミド溶液 (3 mL) に 3-メチルブタナール (93.4 mg) およびトリ
アセトキシ水素化ホウ素ナトリウム (462 mg) を加え、混合物を室温で
8 時間攪拌した。反応混合物に酢酸 (0.5 mL) を加えた。その溶液を予めメ
タノール (5 mL × 3 回) で洗浄した P S-スルホン酸樹脂 (アルゴノート
10 社製、製品番号 800287、ロット番号 00819、1.43 mmol/g、2.60 g)
に注いだ。樹脂をメタノール (5 mL × 3 回) で洗浄した。次に、樹脂を 5%
トリエチルアミン-メタノール溶液 (30 mL) で溶出し、溶出液を濃縮し
た。残渣を塩化メチレン (10 mL) に溶かし、イソシアン酸樹脂 (アルゴ
ノート社製、製品番号 800262、ロット番号 00814、1.43 mmol/g、1.00 g)
15 を加え、室温で 2 時間反応させた。反応液をろ過し、ろ液を濃縮し以下の物
性値を有する本発明化合物 (85 mg) を得た。

TLC: R_f 0.43 (塩化メチレン: メタノール: 28% アンモニア水 = 80 :
10 : 1);

- NMR (DMSO-d₆, 373 K): δ 0.79 (d, J = 6.60 Hz, 3H), 0.80 (m, J = 6.60 Hz, 3H),
20 1.34 (m, 2H), 1.43 (m, 4H), 1.63 (m, 7H), 1.82 (m, 2H), 2.45 (m, 2H), 2.89 (m, 2H),
3.16 (m, 2H), 3.42 (m, 1H), 3.50 (t, J = 5.70 Hz, 4H), 5.83 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 6.02
(m, 1H), 7.66 (d, J = 6.20 Hz, 1H);

HPLC 保持時間 (分): 4.53; MS (m/z): 346 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

- 25 実施例 7 (1) ~ 実施例 7 (375)

相当する化合物を用いて、参考例 1 → 参考例 3 → 実施例 3 → 実施例 7、参

考例 1 → 実施例 4 → 実施例 5 → 実施例 7 または 参考例 1 → 参考例 4 → 実施例 6 → 実施例 7 で示される方法と同様に操作して、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

5 実施例 7 (1)

2- [1- (4-メチルベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

TLC: Rf 0.54 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1);

- 10 NMR(CD₃OD): δ 1.53 (m, 4H), 1.69 (m, 6H), 2.30 (s, 3H), 2.43 (dd, J = 10.03, 5.08 Hz, 1H), 2.57 (m, 1H), 2.70 (m, 1H), 2.92 (dd, J = 9.89, 7.14 Hz, 1H), 3.61 (m, 4H), 4.37 (m, 1H), 4.86 (s, 2H), 5.90 (d, J = 6.32 Hz, 1H), 7.16 (m, 4H), 7.65 (d, J = 6.32 Hz, 1H)。

15 実施例 7 (2)

2- [1- (3-メトキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

TLC: Rf 0.85 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1);

- 20 NMR(DMSO-d₆): δ 1.43 (m, 4H), 1.68 (m, 6H), 2.10 (m, 1H), 2.28 (dd, J = 9.34, 5.49 Hz, 1H), 2.48 (m, 1H), 2.79 (t, J = 8.10 Hz, 1H), 3.33 (s, 3H), 3.51 (m, 4H), 3.71 (s, 2H), 4.21 (m, 1H), 5.81 (m, 1H), 6.44 (s, 1H), 6.81 (m, 3H), 7.19 (m, 1H), 7.69 (m, 1H)。

25 実施例 7 (3)

2- (1-シクロヘキシルメチルピロリジン-3-イルアミノ) -4- (パ

ーヒドロアゼピンー１－イル) ピリミジン

TLC: Rf 0.77 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

5 NMR(DMSO-d₆, 373.1K): δ 0.94 (m, 2H), 1.20 (m, 3H), 1.46 (m, 5H), 1.67 (m, 10H), 2.10 (m, 1H), 2.24 (m, 2H), 2.37 (dd, J = 9.34, 5.22 Hz, 1H), 2.48 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.80 (dd, J = 9.07, 6.87 Hz, 1H), 3.56 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.26 (m, 1H), 5.77 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 7 (4)

10 2-[(3S)-1-イソブチルピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピンー１－イル) ピリミジン

TLC: Rf 0.70 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

15 NMR(DMSO-d₆): δ 0.84 (d, J = 6.59 Hz, 6H), 1.44 (m, 4H), 1.62 (m, 5H), 2.09 (m, 4H), 2.25 (dd, J = 9.34, 5.49 Hz, 1H), 2.45 (m, 2H), 2.77 (t, J = 9.00 Hz, 1H), 3.38 (m, 4H), 4.19 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.37 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.04 Hz, 1H)。

実施例 7 (5)

20 2-[(3R)-1-イソブチルピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピンー１－イル) ピリミジン

TLC: Rf 0.70 (クロロホルム:メタノール:28%アンモニア水=80:10:1);

25 NMR(DMSO-d₆): δ 0.84 (d, J = 6.59 Hz, 6H), 1.44 (m, 4H), 1.62 (m, 5H), 2.09 (m, 4H), 2.25 (dd, J = 9.34, 5.49 Hz, 1H), 2.45 (m, 2H), 2.77 (t, J = 9.00 Hz, 1H), 3.38 (m, 4H), 4.19 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.37 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.04

Hz, 1H)。

実施例 7 (6)

2 - [1 - (2, 4, 6 - トリメトキシベンジル) ピペリジン - 3 - イルア
5 ミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.13; MS (m/z) : 911 (2M + H)⁺, 456 (M + H)⁺; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (7)

10 2 - [1 - (3 - シアノベンジル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パ
ーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.94; MS (m/z) : 781 (2M + H)⁺, 391 (M + H)⁺; HPLC
条件 : B。

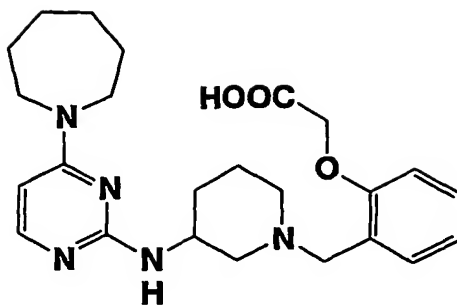
15 実施例 7 (8)

2 - [1 - (3 - メチルブチル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パ
ーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.34; MS (m/z) : 346 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (9)

2 - [1 - (2 - カルボキシメチルオキシベンジル) ピペリジン - 3 - イル
アミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 3.04; MS (m/z): 879 (2M + H)⁺, 440 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

5 実施例 7 (10)

2-[1-(4-ジメチルアミノベンジル)ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.20; MS (m/z): 817 (2M + H)⁺, 409 (M + H)⁺, 134; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (11)

2-[1-(3-フェノキシベンジル)ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.50; MS (m/z): 915 (2M + H)⁺, 458 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (12)

2-(1-カルボキシメチルピペリジン-3-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 2.81; MS (m/z): 667 (2M + H)⁺, 334 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (13)

2- [1- (シクロプロピルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.98; MS (m/z): 659 (2M + H)⁺, 330 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (14)

2- [1- (3-メチルチオプロピル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 3.93; MS (m/z): 364 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (15)

2- [1- (キノリン-2-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 3.92; MS (m/z): 833 (2M + H)⁺, 417 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (16)

2- [1- [(Z)-デカ-4-エニル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
20 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.53; MS (m/z): 827 (2M + H)⁺, 414 (M + H)⁺, 207.5 ;
HPLC 条件: A。

実施例 7 (17)

25 2- [1- (3-フェニルプロピル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.34; MS (m/z): 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (18)

- 5 2 - (1 - ブチルピペリジン - 3 - イルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.23; MS (m/z): 332 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (19)

- 10 2 - (1 - ベンジルピペリジン - 3 - イルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.13; MS (m/z): 731 (2M + H)⁺, 366 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15 実施例 7 (20)

2 - [1 - [(E) - 3 - (4 - ジメチルアミノフェニル) - 2 - プロペニル] ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.36; MS (m/z): 869 (2M + H)⁺, 435 (M + H)⁺, 160;

- 20 HPLC 条件: B。

実施例 7 (21)

2 - [1 - [(E) - 3 - (2 - フリル) - 2 - プロペニル] ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

- 25 HPLC 保持時間 (分): 4.03; MS (m/z): 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (22)

2- [1- (3-ヒドロキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 5 HPLC 保持時間 (分) : 3.43; MS (m/z) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

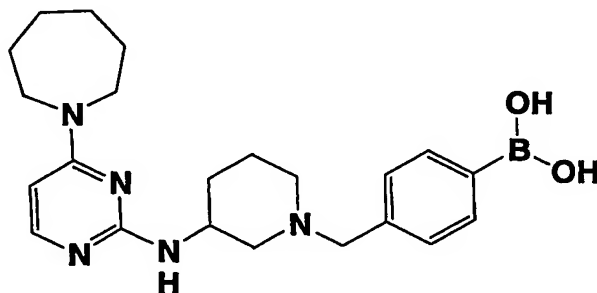
実施例 7 (23)

2- [1- (2-ヒドロキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
10 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.11; MS (m/z) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (24)

15 2- [1- (4-ジヒドロキシボリルベンジル) ピペリジン-3-イルアミ
ノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 3.09; MS (m/z) : 410 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (25)

2- [1- (4-ヘプチルオキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.70; MS(m/z): 959 (2M + H)⁺, 480 (M + H)⁺; HPLC 条件: A。

実施例 7 (26)

- 5 2-[1-(ベンゾ [b] フラン-2-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.14; MS(m/z): 811 (2M + H)⁺, 406 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10 実施例 7 (27)

- 2-[1-(3-メチルベンゾ [b] チオフェン-2-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 15 HPLC 保持時間 (分): 4.56; MS(m/z): 871 (2M + H)⁺, 436 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (28)

- 2-[1-(3, 7-ジメチルオクタ-6-エニル) ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 20 HPLC 保持時間 (分): 3.48; MS(m/z): 827 (2M + H)⁺, 414 (M + H)⁺, 207.5; HPLC 条件: A。

実施例 7 (29)

- 25 2-[1-(4-ピロリジノベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.56; MS(m/z): 869 (2M + H)⁺, 435 (M + H)⁺, 160;

HPLC 条件 : B。

実施例 7 (30)

2 - [1 - [3 - (4 - *t*-ブチルフェニル) - 2 - メチルプロピル] ピペ
5 リジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミ
ジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.58 ; MS (*m/z*) : 927 ($2M + H$)⁺, 464 ($M + H$)⁺, 232.5 ;

HPLC 条件 : A。

10 実施例 7 (31)

2 - [1 - (2 - ベンジルオキシベンジル) ピペリジン - 3 - イルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.48 ; MS (*m/z*) : 943 ($2M + H$)⁺, 472 ($M + H$)⁺ ; HPLC
条件 : B。

15

実施例 7 (32)

2 - [1 - [3 ; 5 - ジー (*t*-ブチル) - 4 - ヒドロキシベンジル] ピペ
リジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミ
ジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.76 ; MS (*m/z*) : 987 ($2M + H$)⁺, 494 ($M + H$)⁺ ; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (33)

2 - [1 - [3 - (4 - イソプロピルフェニル) - 2 - メチルプロピル] ピ
25 ペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリ
ミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.06; MS (m/z) : 899 (2M + H)⁺, 450 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (34)

- 5 2- [1- [3, 4-ビス (ベンジルオキシ) ベンジル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.52; MS (m/z) : 578 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (35)

- 10 2- [1- (3-オクチルオキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.81; MS (m/z) : 987 (2M + H)⁺, 494 (M + H)⁺, 276, 219;

HPLC 条件 : A。

15 実施例 7 (36)

- 2- [1- (3, 5, 5-トリメチルヘキシル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

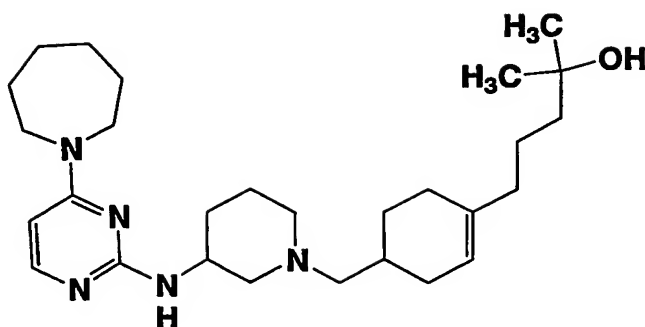
HPLC 保持時間 (分) : 3.43; MS (m/z) : 803 (2M + H)⁺, 402 (M + H)⁺, 201.5;

HPLC 条件 : A。

20

実施例 7 (37)

- 2- [1- [5- (4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル) -1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 4.42 ; MS (m/z) : 939 (2M + H)⁺, 470 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

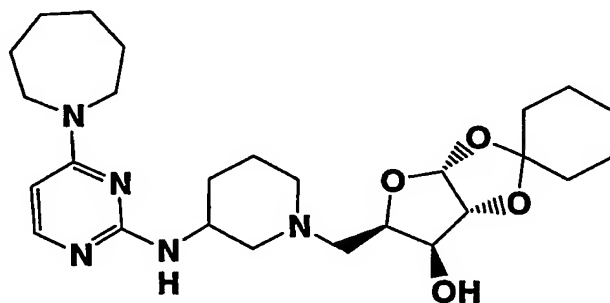
5 実施例 7 (38)

2- [1- (5-ヒドロキシペンチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.50 ; MS (m/z) : 362 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (39)

2- [1- [(1R, 2S, 3R, 5R) -2-ヒドロキシ-4, 6, 8-トリオキサスピロ [ピシクロ [3. 3. 0] オクタン-7, 1'-シクロヘキサン] -3-イルメチル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



15

HPLC 保持時間 (分) : 3.81 ; MS (m/z) : 975 (2M + H)⁺, 488 (M + H)⁺, 290 ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (40)

2 - [1 - (3 - フェニルピラゾール - 4 - イルメチル) ピペリジン - 3 -
イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.76 ; MS (m/z) : 863 (2M + H)⁺, 432 (M + H)⁺, 290 ;

5 HPLC 条件 : B。

実施例 7 (41)

2 - [1 - (4 - ｵｰﾌﾟﾁﾙﾍﾞﾝｼﾞﾙ) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 -
- (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.68 ; MS (m/z) : 843 (2M + H)⁺, 422 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

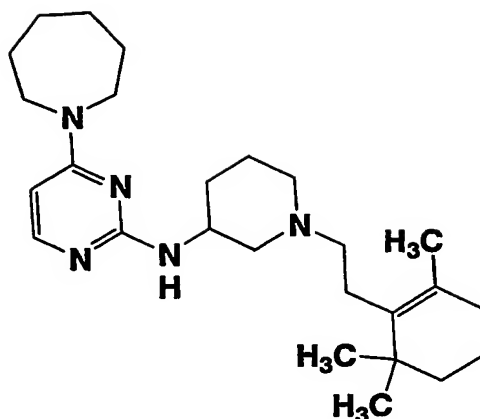
実施例 7 (42)

2 - [1 - (ベンゾ - 1, 4 - ジオキサソ - 6 - イルメチル) ピペリジン -
15 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.98 ; MS (m/z) : 847 (2M + H)⁺, 424 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (43)

20 2 - [1 - [2 - (1, 1, 5 - トリメチル - 1, 2, 3, 4 - テトラヒド
ロベンゼン - 6 - イル) エチル] ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パ
ーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 3.48; MS (m/z): 851 (2M + H)⁺, 426 (M + H)⁺; HPLC 条件: A。

5 実施例 7 (44)

2 - [1 - [4 - (3 - ジメチルアミノプロピルオキシ) ベンジル] ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.17; MS (m/z): 933 (2M + H)⁺, 467 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (45)

2 - [1 - (2 - フリルメチル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 3.82; MS (m/z): 711 (2M + H)⁺, 356 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (46)

20 2 - (1 - イソブチルピペリジン - 3 - イルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.29; MS (m/z): 663 (2M + H)⁺, 332 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (47)

- 5 2- (1-シクロヘキシルメチルピペリジン-3-イルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.86; MS (m/z): 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

- 10 実施例 7 (48)

2- [1- (2-チアゾリルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.65; MS (m/z): 745 (2M + H)⁺, 373 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (49)

2- [1- (4-アセチルアミノベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.56; MS (m/z): 845 (2M + H)⁺, 423 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20

実施例 7 (50)

2- [1- (2-メトキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 25 HPLC 保持時間 (分): 4.13; MS (m/z): 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (5 1)

2 - [1 - (4 - メトキシベンジル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 -
(パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

- 5 HPLC 保持時間 (分) : 4.06; MS (m/z) : 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺; HPLC
条件 : B。

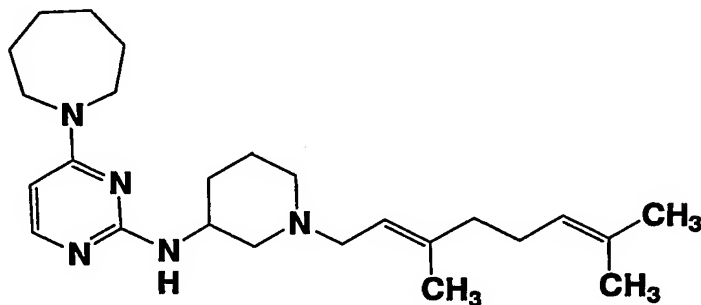
実施例 7 (5 2)

- 2 - [1 - (4 - フェニルベンジル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4 -
10 (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.55; MS (m/z) : 883 (2M + H)⁺, 442 (M + H)⁺; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (5 3)

- 15 2 - [1 - [(2 E) - 3, 7 - ジメチルオクタ - 2, 6 - ジエニル] ピペリ
ジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジ
ン



- HPLC 保持時間 (分) : 4.95; MS (m/z) : 823 (2M + H)⁺, 412 (M + H)⁺; HPLC
20 条件 : B。

実施例 7 (5 4)

2- [1- (4- ジエチルアミノベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.55 ; MS(m/z) : 873 (2M + H)⁺, 437 (M + H)⁺, 162 ;

HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (5 5)

2- [1- (2- エチルヘキシル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.36 ; MS(m/z) : 775 (2M + H)⁺, 388 (M + H)⁺, 276, 194 ;

10 HPLC 条件 : A。

実施例 7 (5 6)

2- [1- (3- フルオロベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.18 ; MS(m/z) : 767 (2M + H)⁺, 384 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (5 7)

2- [1- (2- ヒドロキシエチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
20 (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.29 ; MS(m/z) : 320 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (5 8)

2- [1- (1- ナフチルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
25- ヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.54 ; MS(m/z) : 831 (2M + H)⁺, 416 (M + H)⁺ ; HPLC

条件：B。

実施例 7 (59)

2-[1-(3-ニトロベンジル)ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.08; MS (m/z): 821 (2M + H)⁺, 411 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

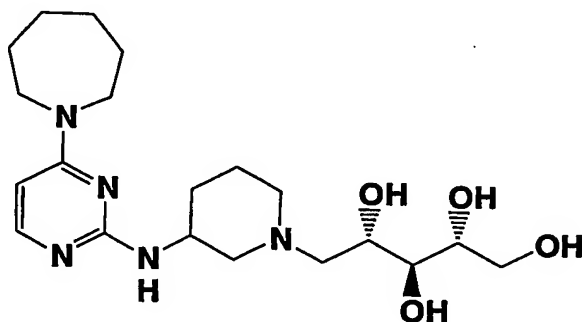
実施例 7 (60)

2-(1-プロピルピペリジン-3-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.01; MS (m/z): 635 (2M + H)⁺, 318 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15 実施例 7 (61)

2-[1-[(2S, 3S, 4R)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロキシペンチル]ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン



20 HPLC 保持時間 (分): 3.11; MS (m/z): 819 (2M + H)⁺, 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (62)

2- [1- (2-チエノメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.05; MS (m/z): 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (63)

2- [1- (4-クロロベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.35; MS (m/z): 801 (2M + H)⁺, 400 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (64)

2- [1- (2, 3-ジメトキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15

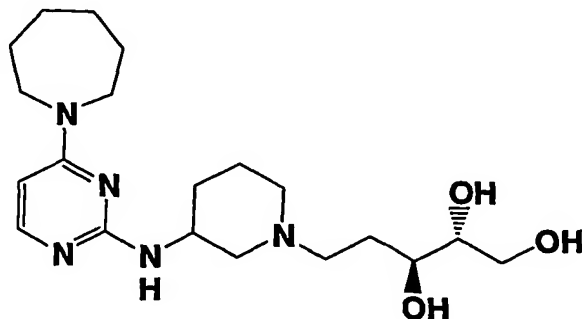
HPLC 保持時間 (分): 4.08; MS (m/z): 426 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (65)

2- [1- [(3S, 4R) -3, 4, 5-トリヒドロキシペンチル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20

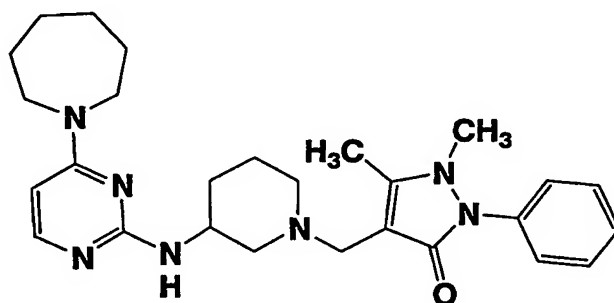
ン



HPLC 保持時間 (分) : 3.18; MS (m/z) : 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (66)

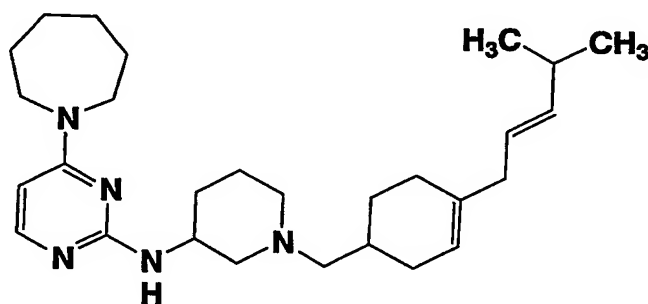
- 5 2- [1- (1, 5-ジメチル-2-フェニル-3-オキソ-2, 3-ジヒドロ-1H-ピラゾール-4-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



- 10 HPLC 保持時間 (分) : 3.52; MS (m/z) : 951 (2M + H)⁺, 476 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (67)

- 15 2- [1- [5- [(E)-4-メチルペンタ-2-エニル] -1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 3.57; MS (m/z) : 903 (2M + H)⁺, 452 (M + H)⁺, 276; HPLC 条件 : A。

実施例 7 (68)

2- [1- (4-ヘキシルオキシ-3-メトキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

- 5 HPLC 保持時間 (分): 4.76; MS (m/z): 991 (2M + H)⁺, 496 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

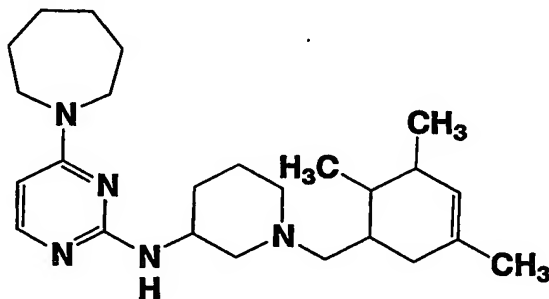
実施例 7 (69)

- 2- [1- (4-フルオロベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.16; MS (m/z): 767 (2M + H)⁺, 384 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (70)

- 15 2- [1- (1, 2, 5-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-3-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



- 20 HPLC 保持時間 (分): 5.11; MS (m/z): 823 (2M + H)⁺, 412 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (71)

2- [1- (3, 5-ジメチル-1-フェニルピラゾール-4-イルメチル)
ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピ
リミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.04; MS(m/z): 919 (2M + H)⁺, 460 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (7 2)

2- [1- (2-ベンジルオキシエチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (7 3)

2- [1- (4-ベンジルオキシ-3-メトキシベンジル) ピペリジン-3
-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 4.29; MS(m/z): 502 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (7 4)

2- [1- (3-ベンジルオキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 4.45; MS(m/z): 943 (2M + H)⁺, 472 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (7 5)

2- [1- (4-ベンジルオキシベンジル) ピペリジン-3-イルアミノ]
25 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.44; MS(m/z): 943 (2M + H)⁺, 472 (M + H)⁺; HPLC

条件：B。

実施例7 (76)

2 - [1 - (4 - フェノキシベンジル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] - 4
5 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.51; MS (m/z) : 915 (2M + H)⁺, 458 (M + H)⁺; HPLC

条件：B。

実施例7 (77)

10 2 - [2 - [N - メチル - N - (2, 4, 6 - トリメトキシベンジル) アミ
ノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.16; MS (m/z) : 430 (M + H)⁺, 416; HPLC 条件 :

B。

15 実施例7 (78)

2 - [2 - [N - メチル - N - (3 - メチルブチル) アミノ] エチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.26; MS (m/z) : 320 (M + H)⁺; HPLC 条件 : B。

20 実施例7 (79)

2 - [2 - [N - (2 - カルボキシメチルオキシベンジル) - N - メチルア
ミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 2.97; MS (m/z) : 827 (2M + H)⁺, 414 (M + H)⁺; HPLC

条件 : B。

25

実施例7 (80)

2 - [2 - [N - (4 - ジメチルアミノベンジル) - N - メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.11 ; MS (m/z) : 383 (M + H)⁺, 134 ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (8 1)

2 - [2 - (N - カルボキシメチル - N - メチルアミノ) エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 2.77 ; MS (m/z) : 615 (2M + H)⁺, 308 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 7 (8 2)

2 - [2 - (N - シクロプロピルメチル - N - メチルアミノ) エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 3.88 ; MS (m/z) : 304 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (8 3)

2 - [2 - [N - メチル - N - (3 - メチルチオプロピル) アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 3.86 ; MS (m/z) : 338 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (8 4)

2 - [2 - [N - (3 - カルボキシプロピル) - N - メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 2.81 ; MS (m/z) : 671 (2M + H)⁺, 336 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (85)

2- [2- [N- (2, 6-ジメチルヘプタ-5-エニル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分) : 4.84 ; MS(m/z) : 374 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (86)

2- [2- [N- (2, 2-ジメチルプロピル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.41 ; MS(m/z) : 320 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (87)

2- [2- [N- [(Z)-デカ-4-エニル] -N-メチルアミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 5.13 ; MS(m/z) : 388 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (88)

2- [2- [N-メチル-N- (3-フェニルプロピル) アミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.22 ; MS(m/z) : 368 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (89)

2- [2- (N-ブチル-N-メチルアミノ) エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 4.11 ; MS(m/z) : 306 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (90)

2-[2-(N-ベンジル-N-メチルアミノ)エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.05; MS(m/z): 340 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

5

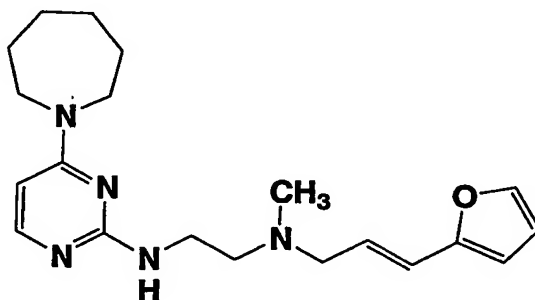
実施例 7 (91)

2-[2-[N-[(E)-3-(4-ジメチルアミノフェニル)-2-プロペニル]-N-メチルアミノ]エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.26; MS(m/z): 817 (2M+H)⁺, 409 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (92)

15 2-[2-[N-[(E)-3-(2-フリル)-2-プロペニル]-N-メチルアミノ]エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 3.95; MS(m/z): 356 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

20 実施例 7 (93)

2-[2-[N-(3-ヒドロキシベンジル)-N-メチルアミノ]エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.44 ; MS(m/z) : 356 (M + H)⁺, 262 ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (9 4)

- 5 2 - [2 - [N - (2 - ヒドロキシベンジル) - N - メチルアミノエチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.95 ; MS(m/z) : 711 (2M + H)⁺, 356 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (9 5)

- 2 - [2 - [3 - N - (4 - ヘプチルオキシベンジル) - N - メチルアミノエチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.11 ; MS(m/z) : 454 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (9 6)

- 2 - [2 - [N - (3 , 7 - ジメチルオクタ - 6 - エニル) - N - メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.98 ; MS(m/z) : 388 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (9 7)

- 2 - [2 - [N - メチル - N - (4 - ピロリジノベンジル) アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.46 ; MS(m/z) : 409 (M + H)⁺, 160 ; HPLC 条件 : B。

25

実施例 7 (9 8)

2- [2- [N- [3- (4-tert-butylphenyl)-2-methylpropyl]-N-methylamino] ethylamino]-4- (pyridazin-1-yl) pyrimidine

HPLC 保持時間 (分) : 4.99 ; MS(m/z) : 438 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (99)

2- [2- [N- (2-benzyloxylbenzyl)-N-methylamino] ethylamino]-4- (pyridazin-1-yl) pyrimidine

HPLC 保持時間 (分) : 4.37 ; MS(m/z) : 446 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 7 (100)

2- [2- [N- [3- (4-isopropylphenyl)-2-methylpropyl]-N-methylamino] ethylamino]-4- (pyridazin-1-yl) pyrimidine

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.89 ; MS(m/z) : 424 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (101)

2- [2- [N- [3,4-bis (benzyloxyl) benzyl]-N-methylamino] ethylamino]-4- (pyridazin-1-yl) pyrimidine

20

HPLC 保持時間 (分) : 4.10 ; MS(m/z) : 552 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (102)

2- [2- [N- (4-octyloxylbenzyl)-N-methylamino] ethylamino]-4- (pyridazin-1-yl) pyrimidine

25

HPLC 保持時間 (分) : 3.71 ; MS(m/z) : 468 (M+H)⁺, 219 ; HPLC 条件 :

A。

実施例 7 (103)

2-[2-[N-メチル-N-(3, 5, 5-トリメチルヘキシル) アミノ]
5 エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 4.98; MS(m/z): 376 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (104)

2-[2-[N-[5-(4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル)-1, 2,
10 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル]-N-メチルアミノ] エ
チルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 4.27; MS(m/z): 444 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (105)

15 2-[2-[N-(5-ヒドロキシペンチル)-N-メチルアミノ] エチル
アミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 3.43; MS(m/z): 336 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (106)

20 2-[2-[N-メチル-N-(3-フェニルピラゾール-4-イルメチル)
アミノ] エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジ
ン
HPLC 保持時間 (分): 3.68; MS(m/z): 811 (2M+H)⁺, 406 (M+H)⁺, 278;
HPLC 条件: B。

25

実施例 7 (107)

2- [2- [N- (4-tert-butylbenzyl) -N-methylamino] エチル
アミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.57 ; MS(m/z) : 396 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (108)

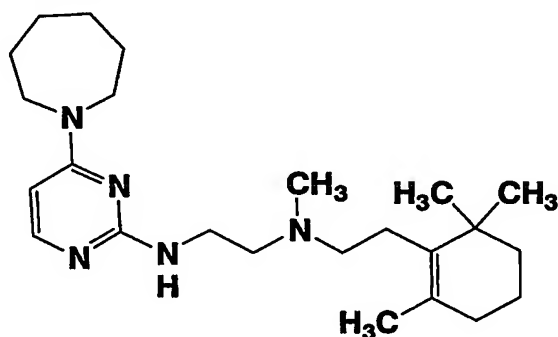
2- [2- [N- (ベンゾ-1, 4-ジオキサソ-6-イルメチル) -N-
メチルアミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピ
リミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.91 ; MS(m/z) : 795 (2M+H)⁺, 398 (M+H)⁺, 292 ;

10 HPLC 条件 : B。

実施例 7 (109)

2- [2- [N-メチル-N- [2- (1, 1, 5-トリメチル-1, 2,
3, 4-テトラヒドロベンゼン-6-イル) エチル] アミノ] エチルアミノ]
15 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 5.03 ; MS(m/z) : 400 (M+H)⁺, 118 ; HPLC 条件 :
B。

20 実施例 7 (110)

2- [2- [N- (2-フリルメチル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ]

－4－（パーヒドロアゼピン－1－イル）ピリミジン

HPLC 保持時間（分）：3.78； MS(m/z)：330 (M+H)⁺, 250； HPLC 条件：B。

5 実施例 7（1 1 1）

2－[2－[N－（4－ジエチルアミノベンジル）－N－メチルアミノ]エチルアミノ]－4－（パーヒドロアゼピン－1－イル）ピリミジン

HPLC 保持時間（分）：4.45； MS(m/z)：411 (M+H)⁺, 162； HPLC 条件：B。

10

実施例 7（1 1 2）

2－[2－[N－（2－エチルヘキシル）－N－メチルアミノ]エチルアミノ]－4－（パーヒドロアゼピン－1－イル）ピリミジン

HPLC 保持時間（分）：4.94； MS(m/z)：362 (M+H)⁺； HPLC 条件：B。

15

実施例 7（1 1 3）

2－[2－[N－メチル－N－（ナフタレン－1－イルメチル）アミノ]エチルアミノ]－4－（パーヒドロアゼピン－1－イル）ピリミジン

HPLC 保持時間（分）：4.36； MS(m/z)：390 (M+H)⁺； HPLC 条件：B。

20

実施例 7（1 1 4）

2－[2－（N－メチル－N－プロピルアミノ）エチルアミノ]－4－（パーヒドロアゼピン－1－イル）ピリミジン

HPLC 保持時間（分）：3.92； MS(m/z)：292 (M+H)⁺； HPLC 条件：B。

25

実施例 7（1 1 5）

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [2 - [N-メチル-N-[(2 S, 3 S, 4 R) - 2, 3, 4, 5-テトラヒドロキシペンチル] アミノ] エチルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.08 ; MS(m/z) : 384 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (116)

2 - [2 - [N- (2, 3-ジメトキシベンジル) - N-メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.00 ; MS(m/z) : 400 (M+H)⁺, 118 ; HPLC 条件 :

10 B。

実施例 7 (117)

2 - [2 - [N-メチル-N-[(3 S, 4 R) - 3, 4, 5-トリヒドロキシペンチル] アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15

HPLC 保持時間 (分) : 3.13 ; MS(m/z) : 735 (2M+H)⁺, 368 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (118)

20 2 - [2 - [N- (1, 5-ジメチル-2-フェニル-3-オキソ-2, 3-ジヒドロ-1H-ピラゾール-4-イルメチル) - N-メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.48 ; MS(m/z) : 450 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

25 実施例 7 (119)

2 - [2 - [N- [5 - [(E) - 4-メチルペンタ-2-エニル] - 1, 2,

3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル]-N-メチルアミノ] エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.50; MS(m/z): 426 (M+H)⁺, 358, 208; HPLC 条件: A。

5

実施例 7 (120)

2-[2-[N-メチル-N-(1, 2, 5-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-3-イルメチル) アミノ] エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.88; MS(m/z): 386 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (121)

2-[2-[N-(3, 5-ジメチル-1-フェニルピラゾール-4-イルメチル)-N-メチルアミノ] エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15

HPLC 保持時間 (分): 3.95; MS(m/z): 867 (2M+H)⁺, 434 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (122)

2-[2-[N-(4-ベンジルオキシ-3-メトキシベンジル)-N-メチルアミノ] エチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20

HPLC 保持時間 (分): 4.21; MS(m/z): 951 (2M+H)⁺, 476 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

25

実施例 7 (123)

2- [2- [N- (4-ベンジルオキシベンジル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.35 ; MS(m/z) : 446 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (1 2 4)

2- [1- (2, 4, 6-トリメトキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.86 ; MS(m/z) : 456 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (1 2 5)

2- [1- (2-カルボキシメチルオキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.04 ; MS(m/z) : 879 (2M+H)⁺, 440 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15

実施例 7 (1 2 6)

2- [1- (4-ジメチルアミノベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.38 ; MS(m/z) : 409 (M+H)⁺, 134 ; HPLC 条件 :

20 B。

実施例 7 (1 2 7)

2- [1- (3-フェノキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 4.58 ; MS(m/z) : 458 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (128)

2-[1-[(E)-2-メチル-2-ブテニル]ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.50; MS(m/z): 344 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

5

実施例 7 (129)

2-(1-カルボキシメチルピロリジン-2-イルメチルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 2.83; MS(m/z): 667 (2M+H)⁺, 334 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (130)

2-(1-シクロプロピルメチルピロリジン-2-イルメチルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 4.11; MS(m/z): 330 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (131)

2-[1-(3-メチルチオプロピル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 364 (M+H)⁺, 276; HPLC 条件: B。

実施例 7 (132)

2-[1-(2,6-ジメチル-ヘプタ-5-エニル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

25

HPLC 保持時間 (分): 3.34; MS(m/z): 400 (M+H)⁺, 276, 200.5; HPLC

条件：A。

実施例7 (133)

2- (1-ネオペンチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パー
5 ヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.71 ; MS(m/z) : 346 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例7 (134)

2- [1- [(Z)-デカ-4-エニル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ]
10 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.49 ; MS(m/z) : 414 (M+H)⁺, 207.5 ; HPLC 条件 :
A。

実施例7 (135)

15 2- [1- (3-フェニルプロピル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.46 ; MS(m/z) : 394 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例7 (136)

20 2- (1-ブチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒドロ
アゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.36 ; MS(m/z) : 332 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例7 (137)

25 2- (1-ベンジルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒド
ロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.26 ; MS(m/z) : 366 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 3 8)

2 - [1 - [(E) - 3 - (4 - ジメチルアミノフェニル) - 2 - プロペニル]
5 ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イ
ル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.54 ; MS(m/z) : 435 (M + H)⁺, 160 ; HPLC 条件 :
B。

10 実施例 7 (1 3 9)

2 - [1 - [(E) - 3 - (2 - フリル) - 2 - プロペニル] ピロリジン - 2
- イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.15 ; MS(m/z) : 382 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (1 4 0)

2 - [1 - (3 - ヒドロキシベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.62 ; MS(m/z) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

20

実施例 7 (1 4 1)

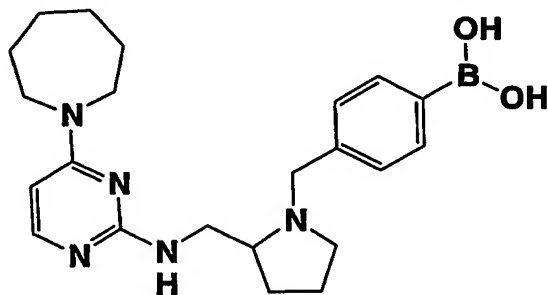
2 - [1 - (2 - ヒドロキシベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.12 ; MS(m/z) : 382 (M + H)⁺, 276 ; HPLC 条件 :

25 B。

実施例 7 (142)

2- [1- (4-ジヒドロキシボリルベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



5 HPLC 保持時間 (分) : 3.20 ; MS(m/z) : 410 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (143)

2- [1- (4-ヘプチルオキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 3.62 ; MS(m/z) : 480 (M + H)⁺, 276 ; HPLC 条件 : A。

実施例 7 (144)

2- [1- (3-メチルベンズ [b] チオフェン-2-イルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.63 ; MS(m/z) : 436 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (145)

20 2- [1- (3, 7-ジメチルオクタ-6-エニル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.43 ; MS(m/z) : 414 (M + H)⁺, 207.5 ; HPLC 条件 :

A。

実施例 7 (146)

2- [1- (4-ピロリジノベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ]
5 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.83 ; MS(m/z) : 435 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (147)

2- [1- [3- (4-tert-ブチルフェニル) -2-メチルプロピル] ピロ
10 リジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル)
ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.53 ; MS(m/z) : 464 (M+H)⁺, 232.5 ; HPLC 条件 :
A。

15 実施例 7 (148)

2- [1- (2-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルア
ミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.58 ; MS(m/z) : 472 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (149)

2- [1- [3- (4-イソプロピルフェニル) -2-メチルプロピル] ピ
ロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル)
ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.46 ; MS(m/z) : 450 (M+H)⁺, 225.5 ; HPLC 条件 :
25 A。

実施例 7 (150)

2- [1- [3, 4-ビス (ベンジルオキシ) ベンジル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.72 ; MS(m/z) : 578 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (151)

2- [1- [5- (4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル) -1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.58 ; MS(m/z) : 470 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

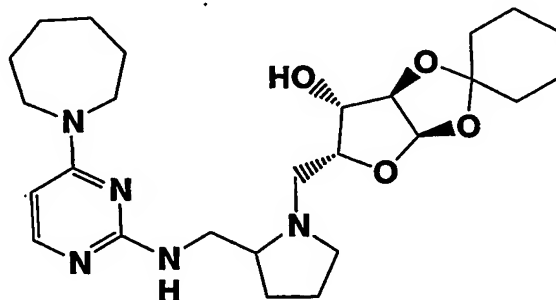
実施例 7 (152)

2- [1- (5-ヒドロキシペンチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 3.58 ; MS(m/z) : 362 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (153)

2- [1- [(1R, 2S, 3R, 5R) -2-ヒドロキシ-4, 6, 8-トリオキサスピロ [ピシクロ [3.3.0] オクタン-7, 1'-シクロヘキサン] -3-イルメチル] ピロリジン-2-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 3.99 ; MS(m/z) : 488 (M + H)⁺, 276 ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (154)

- 5 2 - [1 - (3 - フェニルピラゾール - 4 - イルメチル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分) : 3.79 ; MS(m/z) : 863 (2M + H)⁺, 432 (M + H)⁺, 290 ;
HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (155)

2 - [1 - (4 - t - ブチルベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分) : 4.83 ; MS(m/z) : 422 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (156)

2 - [1 - (1, 4 - ベンゾジオキサン - 6 - イルメチル) ピロリジン - 2 - イルアミノ] 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分) : 4.13 ; MS(m/z) : 424 (M + H)⁺, 276 ; HPLC 条件 : B。

20

実施例 7 (157)

- 2 - [1 - [2 - (1, 1, 5 - トリメチル - 1, 2, 3, 4 - テトラヒドロベンゼン - 6 - イル) エチル] ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン
25 HPLC 保持時間 (分) : 3.41 ; MS(m/z) : 426 (M + H)⁺, 276, 213.5 ; HPLC 条件 : A。

実施例 7 (158)

- 2- [1- [4- (3, 3-ジメチルアミノプロピルオキシ) ベンジル] ピ
ロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル)
5 ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.36; MS(m/z): 467 (M+H)⁺, 234; HPLC 条件: B。

実施例 7 (159)

- 10 2- [1- (2-フリルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.94; MS(m/z): 356 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (160)

- 15 2- (1-イソブチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒ
ドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.48; MS(m/z): 332 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (161)

- 20 2- (1-シクロヘキシルメチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.06; MS(m/z): 372 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (162)

- 25 2- [1- (4-アセチルアミノベンジル) ピロリジン-2-イルメチルア
ミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.65 ; MS (m/z) : 845 (2M + H)⁺, 423 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 6 3)

- 5 2 - [1 - (2 - メトキシベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.32 ; MS (m/z) : 396 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 6 4)

- 10 2 - [1 - (4 - メトキシベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.19 ; MS (m/z) : 396 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 6 5)

- 15 2 - [1 - (4 - フェニルベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.66 ; MS (m/z) : 442 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 6 6)

- 20 2 - [1 - [(2 E) - 3 , 7 - ジメチルオクター 2 , 6 - ジエニル] ピロリ
ジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピ
リミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.40 ; MS (m/z) : 412 (M + H)⁺, 276 ; HPLC 条件 :
A。

25

実施例 7 (1 6 7)

2- [1- (4- ジエチルアミノベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.78 ; MS(m/z) : 437 (M+H)⁺, 162 ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (168)

2- [1- (2-エチルヘキシル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.31 ; MS(m/z) : 388 (M+H)⁺, 194.5 ; HPLC 条件 : A。

10

実施例 7 (169)

2- [1- (ナフタレン-1-イルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.56 ; MS(m/z) : 416 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (170)

2- (1-プロピルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.14 ; MS(m/z) : 318 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (171)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [(2S, 3S, 4R) -2, 3, 4, 5-テトラヒドロキシペンチル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ] ピリミジン

25

HPLC 保持時間 (分) : 3.18 ; MS(m/z) : 410 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (172)

2- [1- (2-チエニルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分): 4.15; MS(m/z): 372 (M+H)⁺, 276; HPLC 条件:
B。

実施例 7 (173)

2- [1- (4-クロロベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -
10 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.47; MS(m/z): 400 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (174)

2- [1- (2, 3-ジメトキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルア
15 ミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.25; MS(m/z): 426 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (175)

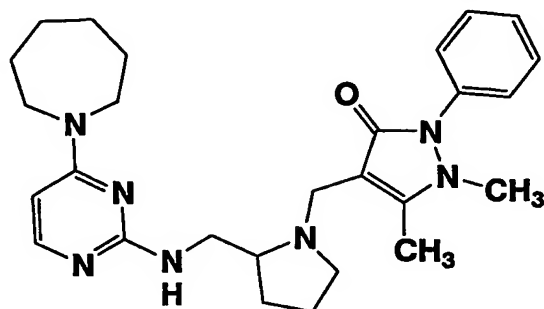
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [(3S, 4R) -3,
20 4, 5-トリヒドロキシペンチル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ] ピ
リミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.21; MS(m/z): 787 (2M+H)⁺, 394 (M+H)⁺; HPLC
条件: B。

25 実施例 7 (176)

2- [1- (1, 5-ジメチル-2-フェニル-3-オキソ-2, 3-ジヒ

ドロ-1H-ピラゾール-4-イルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 3.68 ; MS(m/z) : 476 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (177)

2-[1-[5-[(E)-4-メチル-2-ペンテニル]-1,2,3,4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル]ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 3.53 ; MS(m/z) : 452 (M + H)⁺, 384, 226.5 ; HPLC 条件 : A。

実施例 7 (178)

2-[1-(4-ヘキシルオキシ-3-メトキシベンジル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン
HPLC 保持時間 (分) : 4.86 ; MS(m/z) : 496 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (179)

2-[1-(4-フルオロベンジル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン
20 HPLC 保持時間 (分) : 4.27 ; MS(m/z) : 384 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (180)

2- [1- (1, 2, 5-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-3-イルメチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分): 3.32; MS(m/z): 412 (M+H)⁺, 206.5; HPLC 条件: A。

実施例 7 (181)

2- [1- (3, 5-ジメチル-1-フェニルピラゾール-4-イルメチル) 10 ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.15; MS(m/z): 460 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (182)

15 2- [1- (4-ベンジルオキシ-3-メトキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 4.40; MS(m/z): 502 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (183)

20 2- [1- (3-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 4.56; MS(m/z): 472 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (184)

25 2- [1- (4-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.57 ; MS(m/z) : 472 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 8 5)

2 - [1 - (4 - フェノキシベンジル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ]
5 - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.63 ; MS(m/z) : 458 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 8 6)

2 - [2 - [N - [(E) - 2 - ブテニル] - N - メチル] エチルアミノ] -
10 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.98 ; MS(m/z) : 304 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 8 7)

2 - [2 - (N - メチル - N - ベンチル) エチルアミノ] - 4 - (パーヒド
15 ロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.35 ; MS(m/z) : 320 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 8 8)

2 - [2 - [N - メチル - N - [(E) - 2 - ペンテニル] アミノ] エチルア
20 ミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.18 ; MS(m/z) : 318 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (1 8 9)

2 - [2 - [N - (2 - エチルブチル) - N - メチル] エチルアミノ] - 4
25 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.55 ; MS(m/z) : 334 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (190)

2 - [2 - (N-ヘキシル-N-メチル) エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分) : 4.56 ; MS(m/z) : 334 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (191)

2 - [2 - [N-メチル-N-(2-メチルペンチル) アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.56 ; MS(m/z) : 334 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (192)

2 - [2 - [N-[(E)-2-ヘキセニル] -N-メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.37 ; MS(m/z) : 332 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (193)

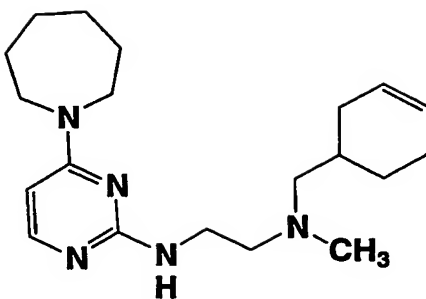
2 - [2 - [N-(3,3-ジメチルブチル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.37 ; MS(m/z) : 334 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (194)

2 - [2 - [N-(1,2,3,4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル) -N-メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1

25 -イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 4.37 ; MS(m/z) : 344 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

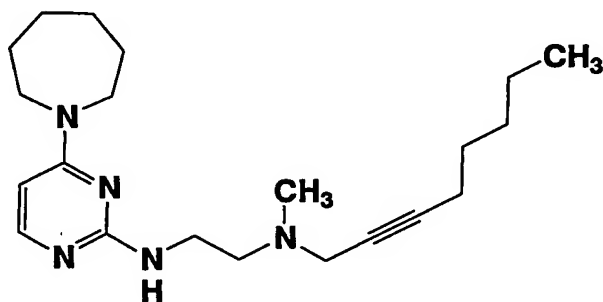
実施例 7 (195)

- 5 2 - [2 - [N - (2 , 3 - ジメチルペンチル) - N - メチルアミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.71 ; MS(m/z) : 348 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (196)

- 10 2 - [2 - [N - メチル - (N - 2 - オクチニル) アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 4.47 ; MS(m/z) : 358 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (197)

- 2 - [2 - [N - メチル - N - (2 - プロピルペンチル) アミノ] エチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.96 ; MS(m/z) : 362 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (198)

2- [1- (2-メトキシエチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分) : 3.68 ; MS(m/z) : 334 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (199)

2- [1- [(E)-2-ブテニル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.23 ; MS(m/z) : 330 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (200)

2- (1-ペンチルピロリジン-2-イルメチルアミノ) -4- (パーヒド
ロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.62 ; MS(m/z) : 346 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (201)

2- [1- [(E)-2-ペンテニル] ピロリジン-2-イルメチルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.45 ; MS(m/z) : 344 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (202)

2- [1- (2-エチルブチル) ピロリジン-2-イルメチルアミノ] -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 4.91 ; MS(m/z) : 360 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (203)

2 - (1 - ヘキシルピロリジン - 2 - イルメチルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.91 ; MS(m/z) : 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5

実施例 7 (204)

2 - [1 - (2 - メチルペンチル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.93 ; MS(m/z) : 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 7 (205)

2 - [1 - [(E) - 2 - ヘキセニル] ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.68 ; MS(m/z) : 358 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15

実施例 7 (206)

2 - [1 - (3, 3 - ジメチルブチル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.65 ; MS(m/z) : 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20

実施例 7 (207)

2 - [1 - (1, 2, 3, 4 - テトラヒドロベンゼン - 2 - イルメチル) ピロリジン - 2 - イルメチルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 4.71 ; MS(m/z) : 370 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (208)

2-[1-(2,3-ジメチルペンチル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.11; MS(m/z): 374 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

5

実施例 7 (209)

2-[1-(2-オクチニル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.68; MS(m/z): 384 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (210)

2-[1-(2-プロピルペンチル)ピロリジン-2-イルメチルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.94; MS(m/z): 388 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (211)

2-[1-(2-メトキシエチル)ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.53; MS(m/z): 320 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

20

実施例 7 (212)

2-[1-[(E)-2-ブテニル]ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 316 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

25

実施例 7 (213)

2- [1- (2, 2-ジメトキシエチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.51 ; MS(m/z) : 350 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (2 1 4)

2- (1-ペンチルピロリジン-3-イルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.39 ; MS(m/z) : 332 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (2 1 5)

2- [1- [(E) -2-ペンテニル] ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.24 ; MS(m/z) : 330 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (2 1 6)

2- [1- (2-エチルブチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.56 ; MS(m/z) : 346 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (2 1 7)

2- (1-ヘキシルピロリジン-3-イルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.63 ; MS(m/z) : 346 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

25 実施例 7 (2 1 8)

2- [1- (2-メチルペンチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パ

ーヒドロアゼピンー1ーイル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.56 ; MS(m/z) : 346 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (219)

- 5 2- [1- [(E)-2-ヘキセニル] ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.45 ; MS(m/z) : 344 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (220)

- 10 2- [1- (3, 3-ジメチルブチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.44 ; MS(m/z) : 346 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (221)

- 15 2- [1- (1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル) ピ
ロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリ
ミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.39 ; MS(m/z) : 356 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (222)

- 2- [1- (2, 3-ジメチルペンチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.70 ; MS(m/z) : 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

25 実施例 7 (223)

- 2- [1- (2, 2-ジメチル-4-ペンテニル) ピロリジン-3-イルア

ミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.62 ; MS(m/z) : 358 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (224)

- 5 2 - [1 - (2 - オクチニル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.53 ; MS(m/z) : 370 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (225)

- 10 2 - [1 - (2 - プロピルペンチル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.97 ; MS(m/z) : 374 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (226)

- 15 2 - [1 - (2 - メトキシエチル) ピペリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.56 ; MS(m/z) : 334 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (227)

- 20 2 - [1 - [(E) - 2 - プテニル] ピペリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.10 ; MS(m/z) : 659 (2M + H)⁺, 330 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

- 25 実施例 7 (228)

2 - [1 - (2, 2 - ジメトキシエチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.56 ; MS (m/z) : 364 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (229)

5 2- (1-ペンチルピペリジン-3-イルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.45 ; MS (m/z) : 346 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (230)

10 2- [1- [(E)-2-ペンテニル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.29 ; MS (m/z) : 344 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (231)

15 2- [1- (2-エチルブチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

TLC : R_f 0.60 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

20 NMR (CDCl₃) : δ 0.84 (t, J = 7.5 Hz, 6H), 1.31 (m, 5H), 1.54 (m, 6H), 1.75 (m, 6H), 2.11 (d, J = 7.0 Hz, 2H), 2.22 (m, 1H), 2.32 (m, 2H), 2.67 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.32 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

HPLC 保持時間 (分) : 4.77 ; MS (m/z) : 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

25 実施例 7 (232)

2- (1-ヘキシルピペリジン-3-イルアミノ) -4- (パーヒドロアゼ

ピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.73; MS(m/z): 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

5 実施例 7 (2 3 3)

2- [1- (2-メチルペンチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.77; MS(m/z): 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (2 3 4)

2- [1- [(E)-2-ヘキセニル] ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.51; MS(m/z): 358 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (2 3 5)

2- [1- (3, 3-ジメチルブチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.50; MS(m/z): 360 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20

実施例 7 (2 3 6)

2- [1- (1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25

HPLC 保持時間 (分): 4.54; MS(m/z): 739 (2M + H)⁺, 370 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (237)

2- [1- (2, 3-ジメチルペンチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分): 4.96; MS(m/z): 747 (2M + H)⁺, 374 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (238)

10 2- [1- (2-オクチニル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4- (パー
ヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.59; MS(m/z): 384 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (239)

15 2- [1- (2-プロピルペンチル) ピペリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.09; MS(m/z): 775 (2M + H)⁺, 388 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (240)

20 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (2, 4, 6-トリメ
トキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.19; MS(m/z): 442 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (241)

25 2- [1- (3-シアノベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.86; MS(m/z): 753 (2M + H)⁺, 377 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (2 4 2)

- 5 2 - [1 - (3 - メチルブチル) ピロリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.33; MS(m/z): 332 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (2 4 3)

- 10 2 - [1 - (2 - カルボキシメチルオキシベンジル) ピロリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.00; MS(m/z): 851 (2M + H)⁺, 426 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15 実施例 7 (2 4 4)

- 2 - [1 - (4 - ジメチルアミノベンジル) ピロリジン - 3 - イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.00; MS(m/z): 395 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20 実施例 7 (2 4 5)

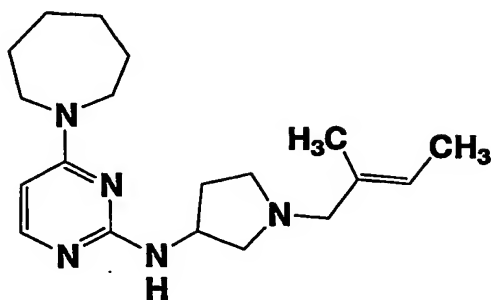
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [1 - (3 - フェノキシベンジル) ピロリジン - 3 - イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.37; MS(m/z): 444 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

25 実施例 7 (2 4 6)

- 2 - [1 - [(E) - 2 - メチル - 2 - プテニル] ピロリジン - 3 - イルアミ

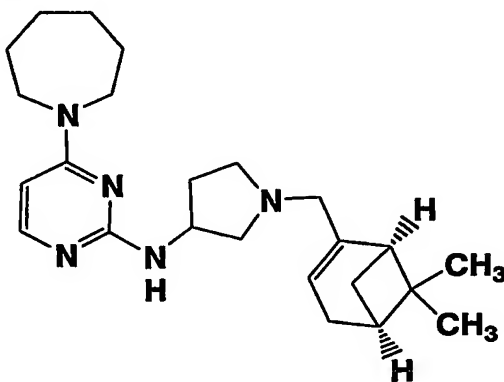
ノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 4.21 ; MS(m/z) : 330 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (247)

2 - [1 - [(1R) - 6, 6 - ジメチルビシクロ [3. 1. 1] ヘプト-2-エン-2-イルメチル] ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



10 HPLC 保持時間 (分) : 4.87 ; MS(m/z) : 396 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (248)

2 - [1 - [(Z) - 4 - デセニル] ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 5.34 ; MS(m/z) : 400 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (249)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (3-フェニルプロピル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.30 ; MS(m/z) : 380 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (250)

2 - (1-ブチルピロリジン-3-イルアミノ) - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.19 ; MS(m/z) : 318 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (251)

2 - [1 - [(E) - 3 - (4-ジメチルアミノフェニル) - 2-プロペニル] ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.01 ; MS(m/z) : 421 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15

実施例 7 (252)

2 - [1 - (3-ヒドロキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.38 ; MS(m/z) : 735 (2M + H)⁺, 368 (M + H)⁺ ; HPLC

20 条件 : B。

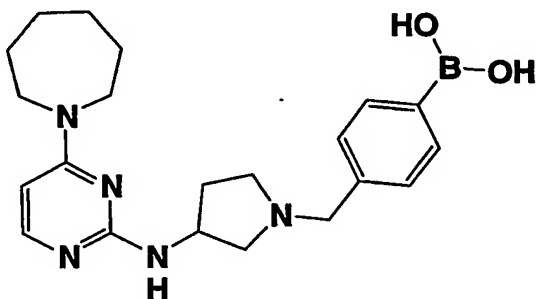
実施例 7 (253)

2 - [1 - (2-ヒドロキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 3.97 ; MS(m/z) : 735 (2M + H)⁺, 368 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (254)

2- [1- (4-ジヒドロキシボリルベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



5

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; MS(m/z) : 396 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (255)

2- [1- (4-ヘプチルオキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10

HPLC 保持時間 (分) : 5.16 ; MS(m/z) : 466 (M + H)⁺, 398 ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (256)

2- [1- (ベンゾ [b] フラン-2-イルメチル) ピロリジン-3-イル
 アミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15

HPLC 保持時間 (分) : 4.08 ; MS(m/z) : 392 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (257)

2- [1- (3-メチルベンゾ [b] チオフェン-2-イルメチル) ピロリ
 ジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジ
 ン

20

HPLC 保持時間 (分): 4.37; MS(m/z): 843 (2M + H)⁺, 422 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (258)

- 5 2-[1-[2-(4-クロロフェニルチオ)ベンジル]ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.85; MS(m/z): 496, 494(M + H)⁺, 398; HPLC 条件: B。

10 実施例 7 (259)

- 2-[1-(3,7-ジメチル-6-オクテニル)ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.10; MS(m/z): 400 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15 実施例 7 (260)

- 4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-(4-ピロリジノベンジル)ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.46; MS(m/z): 421 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20 実施例 7 (261)

- 2-[1-[2-メチル-3-(4-tert-ブチルフェニル)プロピル]ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.03; MS(m/z): 450 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

25

実施例 7 (262)

2- [1- (2-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.37 ; MS(m/z) : 458 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (263)

2- [1- [3, 5-ジ- (t-ブチル) -4-ヒドロキシベンジル] ピロ
リジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミ
ジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.63 ; MS(m/z) : 480 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 7 (264)

2- [1- [3- (4-イソプロピルフェニル) -2-メチルプロピル] ピ
ロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリ
ミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.94 ; MS(m/z) : 436 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (265)

2- [1- [3, 4-ビス (ベンジルオキシ) ベンジル] ピロリジン-3-
イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.48 ; MS(m/z) : 564 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (266)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (3, 5, 5-トリメ
チルヘキシル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 5.11 ; MS(m/z) : 388 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (267)

2- [1- (ブトキシカルボニルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.91 ; MS(m/z) : 376 (M+H)⁺, 260 ; HPLC 条件 :

5 B。

実施例 7 (268)

2- [1- [5- (4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル) -1, 2, 3,
4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル] ピロリジン-3-イルアミノ]
10 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.26 ; MS(m/z) : 456 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

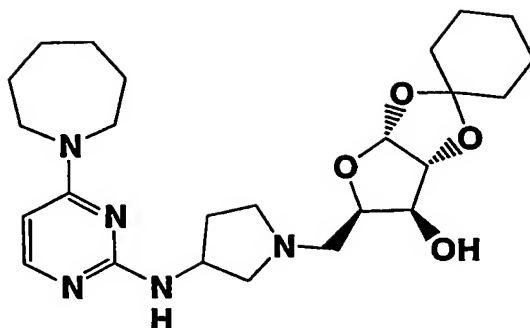
実施例 7 (269)

2- [1- (5-ヒドロキシペンチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4
15 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.45 ; MS(m/z) : 348 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (270)

2- [1- [(1R, 2S, 3R, 5R) -2-ヒドロキシ-4, 6, 8-ト
20 リオキサスピロ [ピシクロ [3.3.0] オクタン-7, 1'-シクロヘキ
サン] -3-イルメチル] ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒド
ロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 3.77 ; MS(m/z) : 474 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (271)

5 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (3-フェニルピラゾール-4-イルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.69 ; MS(m/z) : 835 (2M + H)⁺, 418 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (272)

2 - [1 - (4-tert-ブチルベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.54 ; MS(m/z) : 408 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (273)

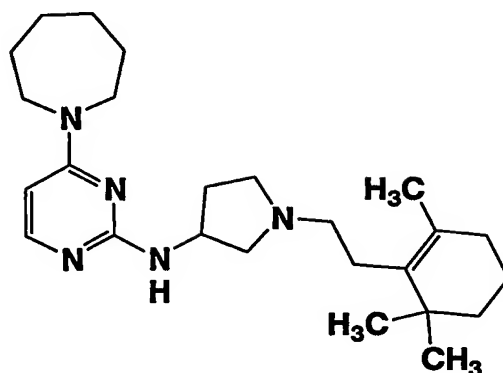
2 - [1 - (1, 4-ベンゾジオキサン-6-イルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.88 ; MS(m/z) : 410 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20 実施例 7 (274)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - [2 - (1, 1, 5-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-6-イル) エチル]

ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 5.23 ; MS(m/z) : 412 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (275)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [4- (3-ジメチル
アミノプロピルオキシ) ベンジル] ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジ
ン

HPLC 保持時間 (分) : 4.08 ; MS(m/z) : 453 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (276)

2- [1- (2-フリルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.78 ; MS(m/z) : 342 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (277)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (2-チアゾリルメチ
ル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.56 ; MS(m/z) : 359 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (278)

2- [1- (4-アセチルアミノベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.47; MS(m/z): 817 (2M + H)⁺, 409 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

5

実施例 7 (279)

2- [1- (2-メトキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 382 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (280)

2- [1- (4-メトキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.95; MS(m/z): 382 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (281)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (4-フェニルベンジ
ル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.41; MS(m/z): 855 (2M + H)⁺, 428 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

20

実施例 7 (282)

2- [1- ((2E) -3, 7-ジメチル-2, 6-オクタジエニル) ピロリ
ジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジ
ン

25

HPLC 保持時間 (分): 4.94; MS(m/z): 398 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (283)

2- [1- (4-ジエチルアミノベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分) : 4.44 ; MS(m/z) : 423 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (284)

2- [1- (2-エチルヘキシル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分) : 4.99 ; MS(m/z) : 374 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (285)

2- [1- (3-フルオロベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分) : 4.04 ; MS(m/z) : 370 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (286)

2- [1- (2-ヒドロキシエチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 3.27 ; MS(m/z) : 306 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (287)

2- [1- (1-ナフチルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分) : 4.33 ; MS(m/z) : 402 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (288)

2-[1-(3-ニトロベンジル)ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.93; MS(m/z): 793 (2M+H)⁺, 397 (M+H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (289)

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-[(2S, 3S, 4R)-2, 3, 4, 5-テトラヒドロキシペンチル]ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン

10

HPLC 保持時間 (分): 3.07; MS(m/z): 791 (2M+H)⁺, 396 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (290)

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-(2-チエニルメチル)ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン

15

HPLC 保持時間 (分): 3.95; MS(m/z): 358 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (291)

2-[1-(4-クロロベンジル)ピロリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

20

HPLC 保持時間 (分): 4.21; MS(m/z): 388, 386 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (292)

2-[1-(1, 3-ベンゾジオキサール-4-イルメチル)ピロリジン-

25

3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン
HPLC 保持時間 (分): 3.93; MS(m/z): 396 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (293)

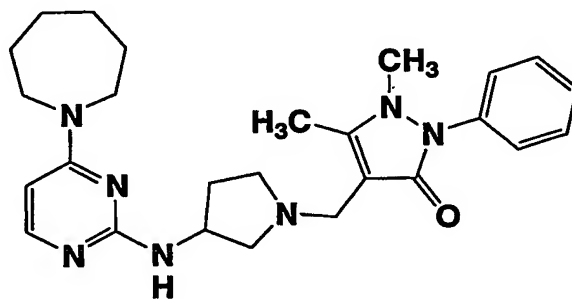
5 4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-((3S, 4R)-3, 4, 5-トリヒドロキシペンチル)ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.14; MS(m/z): 759 (2M+H)⁺, 380 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (294)

2-[1-(1, 5-ジメチル-2-フェニル-3-オキソ-2, 3-ジヒドロ-1H-ピラゾール-4-イルメチル)ピペリジン-3-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

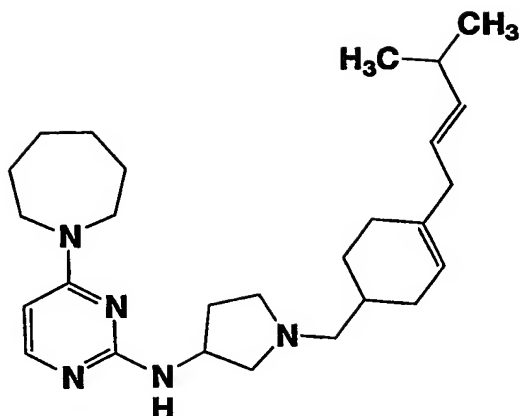


15

HPLC 保持時間 (分): 3.49; MS(m/z): 923 (2M+H)⁺, 462 (M+H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (295)

20 4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-[5-[(E)-4-メチル-2-ペンテニル]-1,2,3,4-テトラヒドロベンゼン-2-イル]ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 5.43 ; MS(m/z) : 438 (M+H)⁺ ; HPLC 條件 : B。

实施例 7 (296)

- 5 2-[1-(3-メトキシ-4-ヘキシルオキシベンジル)ピロリジン-3-イルアミノ] 4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.59; MS (m/z): 963 (2M + H)⁺, 482 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

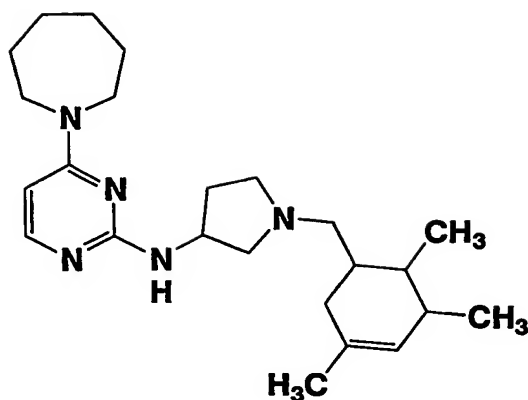
10 实施例7 (297)

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-(4-フルオロベンジ
ル)ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.02 ; MS(m/z) : 370 (M+H)⁺ ; HPLC 條件 : B。

15 实施例7 (298)

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-(1,2,5-トリメチル-1,2,3,4-テトラヒドロベンゼン-3-イルメチル)ピロリジン-3-イルアミノ]ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 4.98 ; MS (m/z) : 398 ($M + H$)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (299)

5 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (3, 5-ジメチル-1-フェニルピラゾール-4-イルメチル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.91 ; MS (m/z) : 891 ($2M + H$)⁺, 446 ($M + H$)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10

実施例 7 (300)

2- [1- (4-ベンジルオキシ-3-メトキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.19 ; MS (m/z) : 975 ($2M + H$)⁺, 488 ($M + H$)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15

実施例 7 (301)

2- [1- (3-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.33 ; MS (m/z) : 458 ($M + H$)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (302)

2- [1- (4-ベンジルオキシベンジル) ピロリジン-3-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.32; MS(m/z): 915 (2M + H)⁺, 458 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (303)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (4-フェノキシベン
ジル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.41; MS(m/z): 887 (2M + H)⁺, 444 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (304)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (2, 4, 6-トリメ
15 トキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.13; MS(m/z): 911 (2M + H)⁺, 456 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (305)

20 2- [1- (3-シアノベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パ
ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.95; MS(m/z): 781 (2M + H)⁺, 391 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

25 実施例 7 (306)

2- [1- (3-メチルブチル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パ

ーヒドロアゼピンー1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.33; MS(m/z): 346 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (307)

5 2- [1- (2-カルボキシメトキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.03; MS(m/z): 879 (2M + H)⁺, 440 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10 実施例 7 (308)

2- [1- (4-ジメチルアミノベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.19; MS(m/z): 817 (2M + H)⁺, 409 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (309)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (3-フェノキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.50; MS(m/z): 915 (2M + H)⁺, 458 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20

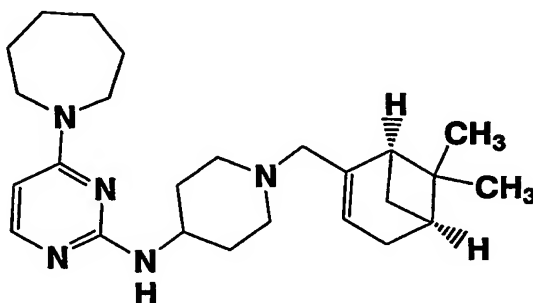
実施例 7 (310)

2- [1- [(E)-2-メチル-2-ブテニル] ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

25 HPLC 保持時間 (分): 4.37; MS(m/z): 687 (2M + H)⁺, 344 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (311)

2-[(1R)-1-(6,6-ジメチルビシクロ[3.1.1]ヘプト-2-エン-2-イルメチル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 5.09; MS(m/z): 819 (2M + H)⁺, 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10 実施例 7 (312)

2-[1-カルボキシメチルピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 2.78; MS(m/z): 667 (2M + H)⁺, 334 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (313)

2-(1-シクロプロピルメチルピペリジン-4-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.97; MS(m/z): 659 (2M + H)⁺, 330 (M + H)⁺; HPLC

20 条件: B。

実施例 7 (314)

2 - [1 - (3 - メチルチオプロピル) ピペリジン - 4 - イルアミノ] - 4 -
- (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.95 ; MS (m/z) : 364 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (3 1 5)

2 - [1 - (2, 6 - ジメチル - 5 - ヘプテニル) ピペリジン - 4 - イルア
ミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.03 ; MS (m/z) : 799 (2M + H)⁺, 400 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

10

実施例 7 (3 1 6)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [1 - (キノリン - 2 - イル
メチル) ピペリジン - 4 - イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.93 ; MS (m/z) : 833 (2M + H)⁺, 417 (M + H)⁺ ; HPLC

15 条件 : B。

実施例 7 (3 1 7)

2 - (1 - ネオペンチルピペリジン - 4 - イルアミノ) - 4 - (パーヒドロ
アゼピン - 1 - イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分) : 4.76 ; MS (m/z) : 691 (2M + H)⁺, 346 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (3 1 8)

2 - [1 - [(Z) - 4 - デセニル] ピペリジン - 4 - イルアミノ] - 4 - (パ
25 - ヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.34 ; MS (m/z) : 414 (M + H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (319)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (3-フェニルプロピル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

- 5 HPLC 保持時間 (分): 4.32; MS(m/z): 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (320)

- 10 2 - [1 - プチルピペリジン-4-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.21; MS(m/z): 332 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (321)

- 15 2 - [1 - [(E) - 3 - (4-ジメチルアミノフェニル) - 2-プロペニル] ピペリジン-4-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.33; MS(m/z): 869 (2M + H)⁺, 435 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20 実施例 7 (322)

2 - [1 - (3-ヒドロキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] - 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.44; MS(m/z): 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

25

実施例 7 (323)

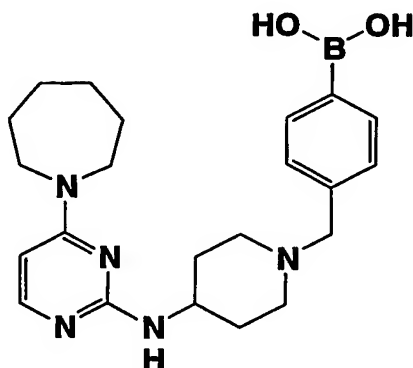
2- [1- (2-ヒドロキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4-
- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.10; MS(m/z): 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

5

実施例 7 (324)

2- [1- (4-ジヒドロキシボリルベンジル) ピペリジン-4-イルアミ
ノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



10 HPLC 保持時間 (分): 3.11; MS(m/z): 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (325)

2- [1- (4-ヘプチルオキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 5.31; MS(m/z): 480 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (326)

2- [1- (ベンゾ [b] フラン-2-イルメチル) ピペリジン-4-イル
アミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 4.17; MS(m/z): 811 (2M + H)⁺, 406 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (327)

2- [1- (3-メチルベンゾ [b] チオフェン-2-イル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分): 4.54; MS(m/z): 871 (2M + H)⁺, 436 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (328)

2- [1- [2- (4-クロロフェニルチオ) ベンジル] ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 5.03; MS(m/z): 510, 508 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (329)

15 2- [1- (3, 7-ジメチル-6-オクテニル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 5.12; MS(m/z): 414 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (330)

20 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (4-ピロリジノベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.57; MS(m/z): 869 (2M + H)⁺, 435 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

25 実施例 7 (331)

2- [1- [2-メチル-3- (4-tert-ブチルフェニル) プロピル] ピペ

リジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.21 ; MS(m/z) : 464 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (332)

2-[1-(2-ベンジルオキシベンジル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.44 ; MS(m/z) : 472 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (333)

2-[1-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシベンジル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.72 ; MS(m/z) : 494 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

15 実施例 7 (334)

2-[1-[3-(4-イソプロピルフェニル)-2-メチルプロピル]ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.09 ; MS(m/z) : 450 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

20

実施例 7 (335)

2-[1-[3,4-ビス(ベンジルオキシ)ベンジル]ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.57 ; MS(m/z) : 578 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

25

実施例 7 (336)

2- [1- (4-オクチルオキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.64 ; MS(m/z) : 494 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

5 実施例 7 (337)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (3, 5, 5-トリメ
チルヘキシル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 5.16 ; MS(m/z) : 402 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

10 実施例 7 (338)

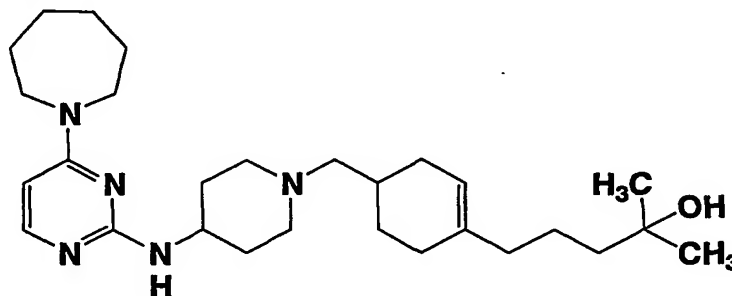
2- (1-ブトキシカルボニルメチルピペリジン-4-イルアミノ) -4-
(パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 3.99 ; MS(m/z) : 779 (2M+H)⁺, 390 (M+H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

15

実施例 7 (339)

2- [1- [5- (4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル) -1, 2, 3,
4-テトラヒドロベンゼン-2-イルメチル] ピペリジン-4-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



20

HPLC 保持時間 (分) : 4.41 ; MS(m/z) : 470 (M+H)⁺ ; HPLC 条件 : B。

実施例 7 (340)

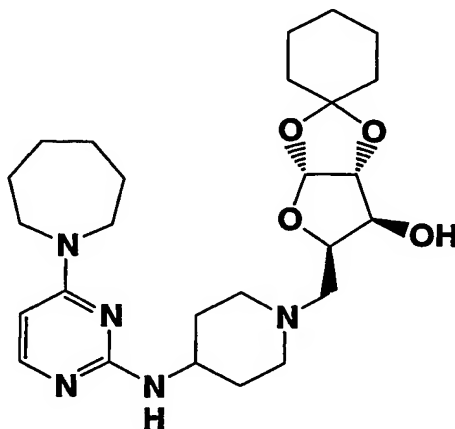
2- [1- (5-ヒドロキシペンチル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4-
 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.49; MS (m/z): 723 (2M + H)⁺, 362 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (341)

2- [1- [(1R, 2S, 3R, 5R) -2-ヒドロキシ-4, 6, 8-トリ
 リオキサスピロ [ビシクロ [3. 3. 0] オクタン-7, 1'-シクロヘキ
 10 サン] -3-イルメチル] ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒド
 ロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 3.80; MS (m/z): 488 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15 実施例 7 (342)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (3-フェニルピラゾ
 ール-4-イルメチル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.77; MS (m/z): 863 (2M + H)⁺, 432 (M + H)⁺; HPLC
 条件: B。

20

実施例 7 (343)

2- [1- (4-tert-ブチルベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4-
 (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.68; MS(m/z): 843 (2M + H)⁺, 422 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

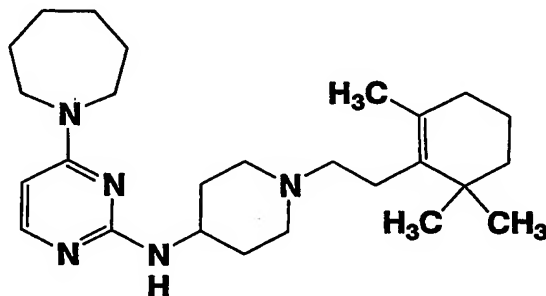
実施例 7 (344)

2- [1- (1, 4-ベンゾジオキサン-6-イルメチル) ピペリジン-4-
 イルアミノ] 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 3.99; MS(m/z): 847 (2M + H)⁺, 424 (M + H)⁺; HPLC
 条件: B。

実施例 7 (345)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [2- (1, 1, 5-
 15 トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-6-イル) エチル]
 ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 5.18; MS(m/z): 426 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20 実施例 7 (346)

2- [1- [4- (3-ジメチルアミノプロピルオキシ) ベンジル] ピペリ
 ジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジ

ン

HPLC 保持時間 (分): 4.22; MS(m/z): 467 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (347)

- 5 2-[1-(2-フリルメチル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.82; MS(m/z): 711 (2M + H)⁺, 356 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10 実施例 7 (348)

2-(1-イソブチルピペリジン-4-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.30; MS(m/z): 663 (2M + H)⁺, 332 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

15

実施例 7 (349)

2-(1-シクロヘキシルメチルピペリジン-4-イルアミノ)-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.85; MS(m/z): 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

20

実施例 7 (350)

4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)-2-[1-(2-チアゾリルメチル)ピペリジン-4-イルアミノ]ピリミジン

- 25 HPLC 保持時間 (分): 3.64; MS(m/z): 745 (2M + H)⁺, 373 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (3 5 1)

2 - [1 - (4 - アセチルアミノベンジル) ピペリジン - 4 - イルアミノ]
- 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

5 HPLC 保持時間 (分): 3.55; MS(m/z): 845 (2M + H)⁺, 423 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (3 5 2)

10 2 - [1 - (2 - メトキシベンジル) ピペリジン - 4 - イルアミノ] - 4 -
(パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.13; MS(m/z): 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (3 5 3)

15 2 - [1 - (4 - メトキシベンジル) ピペリジン - 4 - イルアミノ] - 4 -
(パーヒドロアゼピン - 1 - イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

20 実施例 7 (3 5 4)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [1 - (4 - フェニルベンジ
ル) ピペリジン - 4 - イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.54; MS(m/z): 883 (2M + H)⁺, 442 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

25

実施例 7 (3 5 5)

2-[1-[(2E)-3,7-ジメチル-2,6-オクタジエニル]ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間(分):4.89; MS(m/z):823 (2M+H)⁺, 412 (M+H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例7 (356)

2-[1-(4-ジェチルアミノベンジル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

10 HPLC 保持時間(分):4.57; MS(m/z):873 (2M+H)⁺, 437 (M+H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例7 (357)

2-[1-(3-フルオロベンジル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

15 HPLC 保持時間(分):4.15; MS(m/z):767 (2M+H)⁺, 384 (M+H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例7 (358)

20 2-[1-(1-ナフチルメチル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パーヒドロアゼピン-1-イル)ピリミジン

HPLC 保持時間(分):4.54; MS(m/z):831 (2M+H)⁺, 416 (M+H)⁺; HPLC
条件: B。

25 実施例7 (359)

2-[1-(3-ニトロベンジル)ピペリジン-4-イルアミノ]-4-(パ

ーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.04; MS(m/z): 821 (2M + H)⁺, 411 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

5 実施例 7 (360)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- (1-プロピルピペリジン-4-イルアミノ) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.02; MS(m/z): 635 (2M + H)⁺, 318 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

10

実施例 7 (361)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [(2S, 3S, 4R) -2, 3, 4, 5-テトラヒドロキシペンチル] ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 3.14; MS(m/z): 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (362)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (2-チエニルメチル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS(m/z): 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (363)

25 2- [1- (4-クロロベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.35; MS(m/z): 799 (2M + H)⁺, 402, 400 (M + H)⁺;

HPLC 条件：B。

実施例 7 (364)

2- [1- (1, 3-ベンゾジオキソール-4-イル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.02; MS (m/z): 819 (2M + H)⁺, 410 (M + H)⁺; HPLC 条件：B。

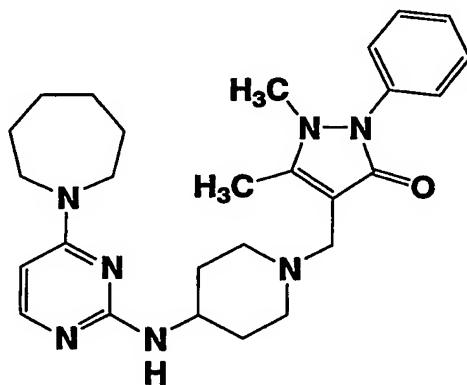
実施例 7 (365)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- [(3S, 4R) -3, 4, 5-トリヒドロキシペンチル] ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 3.18; MS (m/z): 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺; HPLC 条件：B。

実施例 7 (366)

2- [1- (1, 5-ジメチル-2-フェニル-3-オキソ-2, 3-ジヒドロ-1H-ピラゾール-4-イルメチル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン



HPLC 保持時間 (分): 3.51; MS (m/z): 951 (2M + H)⁺, 476 (M + H)⁺; HPLC

条件：B。

実施例 7 (367)

2- [1- (3-メトキシ-4-ヘキシロキシベンジル) ピペリジン-4-
5-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.72; MS(m/z) : 496 (M+H)⁺; HPLC 条件 : B。

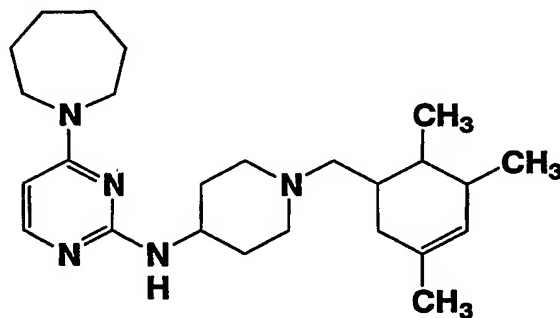
実施例 7 (368)

2- [1- (4-フルオロベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ] -4-
10 (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.13; MS(m/z) : 767 (2M+H)⁺, 384 (M+H)⁺; HPLC
条件 : B。

実施例 7 (369)

15 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [1- (1, 2, 5-トリメ
チル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロベンゼン-3-イルメチル) ピペリジ
ン-4-イルアミノ] ピリミジン



HPLC 保持時間 (分) : 5.18; MS(m/z) : 823 (2M+H)⁺, 412 (M+H)⁺; HPLC
20 条件 : B。

実施例 7 (370)

2- [1- (3, 5-ジメチル-1-フェニルピラゾール-4-イルメチル)
ピペリジン-4-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピ
リミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.02; MS (m/z): 919 (2M + H)⁺, 460 (M + H)⁺; HPLC

5 条件: B。

実施例 7 (371)

2- [1- (2-ベンジルオキシエチル) ピペリジン-4-イルアミノ] -
4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

10 HPLC 保持時間 (分): 4.06; MS (m/z): 410 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (372)

2- [1- (4-ベンジルオキシ-3-メトキシベンジル) ピペリジン-4
-イルアミノ] -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

15 HPLC 保持時間 (分): 4.30; MS (m/z): 502 (M + H)⁺; HPLC 条件: B。

実施例 7 (373)

2- [1- (3-ベンジルオキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ]
-4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

20 HPLC 保持時間 (分): 4.44; MS (m/z): 943 (2M + H)⁺, 472 (M + H)⁺; HPLC
条件: B。

実施例 7 (374)

2- [1- (4-ベンジルオキシベンジル) ピペリジン-4-イルアミノ]
25 -4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) ピリミジン

HPLC 保持時間 (分): 4.44; MS (m/z): 943 (2M + H)⁺, 472 (M + H)⁺; HPLC

条件：B。

実施例 7 (375)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (4-フェノキシベン
5 ジル) ピペリジン-4-イルアミノ] ピリミジン

HPLC 保持時間 (分) : 4.51 ; MS (m/z) : 915 (2M + H)⁺, 458 (M + H)⁺ ; HPLC
条件 : B。

実施例 8

10 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(1-ベンジル) アゼチジン
- 3-イルアミノ] ピリミジン

参考例 1 で製造した化合物と 1-ベンジル-3-アミノアゼチジンを用い
て実施例 4 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合
物を得た。

15 TLC : R_f 0.40 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 :
1) ;

MS (m/z) : 338 (M + H)⁺, 248, 190 ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.01 ; HPLC 条件 : A。

20 実施例 8 (1) ~ 実施例 8 (2)

参考例 1 で製造した化合物と相当するアミン化合物を用いて実施例 8 で示
される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 8 (1)

25 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - (1-ベンジル)
ピペリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

T L C : R f 0.50 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 : 1) ;

N M R (DMSO- d_6 , 323K) : δ 1.33 (m, 1H), 1.45 (m, 4H), 1.51 (m, 1H), 1.65 (m, 5H), 1.76 (m, 1H), 1.90 (m, 1H), 2.04 (m, 1H), 2.60 (m, 1H), 2.85 (m, 1H), 3.28 (m, 2H), 3.49 (m, 4H), 3.84 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.94 (m, 1H), 7.23 (m, 1H), 7.29 (m, 4H), 7.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

M S (m/z) : 366 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; HPLC 条件 : A。

10 実施例 8 (2)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [(3 S) - (1 - ベンジル) パーヒドロアゼピン - 3 - イルアミノ] ピリミジン

T L C : R f 0.45 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

15 N M R (DMSO- d_6) : δ 1.41 (m, 5H), 1.64 (m, 9H), 2.56 (m, 3H), 2.81 (m, 1H), 3.49 (m, 4H), 3.63 (s, 2H), 3.97 (m, 1H), 5.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.06 (m, 1H), 7.24 (m, 5H), 7.68 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

M S (m/z) : 380 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 9

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - (アゼチジン - 3 - イルアミノ) ピリミジン

25 実施例 8 で製造した化合物を用いて実施例 5 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

T L C : R f 0.65 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 =

80:20:4) ;

NMR(CDCl₃): δ 1.52 (m, 4H), 1.73 (m, 4H), 3.54 (m, 4H), 3.61 (m, 2H), 3.89 (m, 2H), 4.85 (m, 1H), 5.41 (m, 1H), 5.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS(m/z) : 248 (M + H)⁺, 124.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 保持時間 (分) : 2.81 ; HPLC 条件 : A。

実施例 9 (1) ~ 実施例 9 (3)

相当するベンジルアミン化合物を用いて実施例 9 で示される方法と同様に
して、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

10

実施例 9 (1)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [(3 S) - ピペリジン - 3 -
イルアミノ] ピリミジン

15

TLC : R_f 0.70 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 =
80:20:4) ;

NMR(DMSO-d₆): δ 1.43 (m, 6H), 1.62 (m, 5H), 1.82 (m, 1H), 2.34 (m, 2H), 2.73
(m, 1H), 3.00 (m, 1H), 3.45 (m, 4H), 3.75 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.21 (m,
1H), 7.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS(m/z) : 276 (M + H)⁺, 138.5 (M + 2H)²⁺ ;

20

HPLC 保持時間 (分) : 2.85 ; HPLC 条件 : A。

実施例 9 (2)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [(3 S) - パーヒドロアゼピ
ン - 3 - イルアミノ] ピリミジン

25

TLC : R_f 0.33 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1) ;

NMR(DMSO- d_6) : δ 1.34 (m, 5H), 1.70 (m, 9H), 2.60 (dd, J = 13.5, 7.0 Hz, 1H),
2.72 (t, J = 5.5 Hz, 2H), 2.90 (dd, J = 13.5, 4.0 Hz, 1H), 3.57 (m, 4H), 3.90 (m, 1H),
5.81 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS(m/z) : 290 (M + H)⁺, 145.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ; HPLC 条件 : A。

実施例 9 (3)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - パーヒドロアゼピ
ン-3-イルアミノ] - 5, 6, 7, 8 - テトラヒドロキナゾリン

10 TLC : Rf 0.32 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1) ;

NMR(DMSO- d_6) : δ 1.43 (m, 6H), 1.56 (m, 5H), 1.73 (m, 7H), 2.43 (m, 4H), 2.57
(m, 1H), 2.71 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 2.87 (m, 1H), 3.50 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 3.85 (m, 1H),
5.85 (m, 1H) ;

15 MS(m/z) : 344(M + H)⁺, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(1-イソブチル) アゼチジ
20 ン-3-イルアミノ] ピリミジン

実施例 9 で製造した化合物とイソブチルアルデヒドを用いて実施例 7 で示
される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

TLC : Rf 0.40 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 :
1) ;

25 NMR(DMSO- d_6 , 323K) : δ 0.84 (d, J = 7.0 Hz, 6H), 1.47 (m, 4H), 1.52 (m, 1H),
1.69 (m, 4H), 2.19 (d, J = 7.0 Hz, 2H), 2.80 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 3.54 (m, 6H), 4.33 (m,

1H), 5.87 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.62 (m, 1H), 7.73 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS (m/z) : 304 (M + H)⁺, 248, 152.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.96 ; HPLC 条件 : A。

5 実施例 10 (1) ~ 実施例 10 (12)

相当するアミン化合物と相当するアルデヒド化合物を用いて実施例 10 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 10 (1)

10 4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (2-エチルブチル)
アゼチジン-3-イルアミノ] ピリミジン

TL C : R f 0.40 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 : 1) ;

15 NMR (DMSO-d₆, 323K) : δ 0.82 (t, J = 7.5 Hz, 6H), 1.15 (m, 1H), 1.25 (m, 2H),
1.30 (m, 2H), 1.48 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 2.27 (d, J = 6.5 Hz, 2H), 2.79 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 3.53 (m, 6H), 4.32 (m, 1H), 5.87 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.62 (m, 1H), 7.73 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS (m/z) : 332 (M + H)⁺, 248, 166.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.09 ; HPLC 条件 : A。

20

実施例 10 (2)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(1-シクロヘキシル) アゼチジン-3-イルアミノ] ピリミジン

25 TL C : R f 0.40 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 : 1) ;

MS (m/z) : 330 (M + H)⁺, 248, 165.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10 (3)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [1 - (2-ビリジニルメチ
5 ル) アゼチジン-3-イルアミノ] ピリミジン

TLC : Rf 0.33 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 :
1) ;

MS(m/z) : 339 (M + H)⁺, 170 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.94 ; HPLC 条件 : A。

10

実施例 10 (4)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - (1-イソブチル)
ピペリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

15 TLC : Rf 0.50 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 :
1) ;

NMR(DMSO-d₆, 323K) : δ 0.85 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 0.87 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 1.33
(m, 1H), 1.48 (m, 5H), 1.69 (m, 7H), 1.88 (m, 1H), 2.05 (m, 3H), 2.57 (m, 1H), 2.88
(m, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.83 (m, 1H), 5.87 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.97 (m, 1H), 7.73 (d,
J = 6.0 Hz, 1H) ;

20 MS(m/z) : 332 (M + H)⁺, 276, 166.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.98 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10 (5)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - 1 - (2-エチル
25 ブチル) ピペリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

オイル状物質 ;

TLC : Rf 0.60 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 : 10 : 1) ;

NMR(CDCl₃) : δ 0.84(t, J = 7.5 Hz, 6H), 1.31(m, 5H), 1.54(m, 5H), 1.75(m, 5H), 1.88(m, 2H), 2.10(d, J = 7.0 Hz, 2H), 2.31(m, 3H), 2.65(m, 1H), 3.56(m, 4H), 4.02(m, 1H), 5.17(m, 1H), 5.76(d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.80(d, J = 6.0 Hz, 1H)。

MS(m/z) : 360 (M + H)⁺, 276, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.11 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10 (6)

10 4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [(3S) - 1 - (2 - ピリジニルメチル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] ピリミジン

TLC : Rf 0.35 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 : 1) ;

15 NMR(DMSO-d₆, 323K) : δ 1.34 (m, 1H), 1.45 (m, 4H), 1.54 (m, 1H), 1.65 (m, 5H), 1.77 (m, 1H), 1.99 (m, 1H), 2.13 (m, 1H), 2.65 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.55 (d, J = 13.5 Hz, 1H), 3.63 (d, J = 13.5 Hz, 1H), 3.86 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.99 (m, 1H), 7.23 (m, 1H), 7.44 (d, J = 8.0 Hz, 1H), 7.71 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.74 (dd, J = 8.0, 2.0 Hz, 1H), 8.47 (m, 1H) ;

MS(m/z) : 367 (M + H)⁺, 184 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10 (7)

4 - (パーヒドロアゼピン - 1 - イル) - 2 - [(3S) - (1 - シクロヘキシル) ピペリジン - 3 - イルアミノ] ピリミジン

25 オイル状物質 ;

TLC : Rf 0.48 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :

10 : 1) ;

NMR(CDCl₃) : δ 1.06(m, 1H), 1.22(m, 4H), 1.55(m, 5H), 1.76(m, 12H), 2.28(m, 2H), 2.45(m, 1H), 2.56(m, 1H), 2.95(m, 1H), 3.57(m, 4H), 3.98(m, 1H), 5.06(m, 1H), 5.75(d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.79(d, J = 6.0 Hz, 1H)。

5 MS(m/z) : 358 (M + H)⁺, 276, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.94 ; HPLC 条件 : A。

実施例 10 (8)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - 1 - (テトラヒド
10 ロー2H-ピラン-4-イル) ピペリジン-3-イルアミノ] ピリミジン
オイル状物質 ;

TLC : Rf 0.45 (クロロホルム : メタノール : 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1) ;

15 NMR(CDCl₃) : δ 1.55(m, 8H), 1.75(m, 8H), 1.91(m, 1H), 2.28(m, 1H), 2.45(m,
2H), 2.58 (m, 1H), 2.96(m, 1H), 3.36(m, 2H), 3.57(m, 4H), 4.01(m, 2H), 5.11(m,
1H), 5.77(d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.79(d, J = 6.0 Hz, 1H)。

MS(m/z) : 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.78 ; HPLC 条件 : A。

20 実施例 10 (9)

4 - (パーヒドロアゼピン-1-イル) - 2 - [(3S) - (1-イソブチル)
パーヒドロアゼピン-3-イルアミノ] ピリミジン

TLC : Rf 0.50 (酢酸エチル : メタノール : トリエチルアミン = 20 : 2 :
1) ;

25 NMR(DMSO-d₆, 323K) : δ 0.87 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 0.88 (d, J = 6.5 Hz, 3H), 1.48
(m, 4H), 1.62 (m, 5H), 1.68 (m, 4H), 1.76 (m, 2H), 2.21 (dd, J = 12.0, 7.5 Hz, 1H),

2.26 (dd, $J = 12.0, 7.0$ Hz, 1H), 2.60 (m, 3H), 2.77 (dd, $J = 13.5, 4.0$ Hz, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.94 (m, 1H), 5.84 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H), 5.87 (m, 1H), 7.72 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H);

MS (m/z): 346 ($M + H$)⁺, 290, 173.5 ($M + 2H$)²⁺;

5 HPLC 保持時間 (分): 3.00; HPLC 条件: A。

実施例 10 (10)

4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [(3S) -1- (2-エチル
ブチル) パーヒドロアゼピン-3-イルアミノ] ピリミジン

10 TLC: Rf 0.60 (クロロホルム: メタノール: 28%アンモニア水 = 80 :
10 : 1);

NMR(DMSO-d₆, 323K): δ 0.83 (t, $J = 7.5$ Hz, 3H), 0.85 (t, $J = 7.5$ Hz, 3H), 1.30 (m, 6H), 1.48 (m, 4H), 1.62 (m, 3H), 1.69 (m, 4H), 1.75 (m, 2H), 2.29 (m, 2H), 2.58 (m, 3H), 2.76 (dd, $J = 13.5, 4.0$ Hz, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.95 (m, 1H), 5.84 (m, 2H),
15 7.72 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H);

MS (m/z): 374 ($M + H$)⁺, 290, 187.5 ($M + 2H$)²⁺;

HPLC 保持時間 (分): 3.12; HPLC 条件: A。

実施例 10 (11)

20 4- (パーヒドロアゼピン-1-イル) -2- [(3S) - (1-シクロヘキ
シル) ピロリジン-3-イルアミノ] ピリミジン

オイル状物質;

TLC: Rf 0.35 (酢酸エチル: メタノール: トリエチルアミン = 20 : 2 :
1);

25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.15(m, 6H), 1.44(m, 6H), 1.66(m, 7H), 1.78(m, 1H), 2.01(m,
2H), 2.34(dd, $J = 9.0, 5.5$ Hz, 1H), 2.55(m, 1H), 2.87(t, $J = 8.5$ Hz, 1H), 3.52 (m, 4H),

4.17(m, 1H), 5.83(d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.38(m, 1H), 7.71(d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS (m/z) : 344 (M + H)⁺, 262, 182 ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ; HPLC 条件 : A。

5 実施例 11-0001 ~ 実施例 11-1035

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 11-0001

10 N¹-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)ピリミジン-2-イル]-N³, N³-ジメチルプロパン-1,3-ジアミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.63 (m, 2H), 2.11 (s, 6H), 2.23 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 2.83 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 3.23 (q, J = 6.5 Hz, 2H), 3.76 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 4.66 (s, 2H), 6.04 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.53 (m, 1H), 7.19 (m, 4H), 7.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

15 MS (ESI, Pos. 20 V) : 312 (M + H)⁺, 278, 156 ;

TL C : R_f 0.19 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0002

20 N¹-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)ピリミジン-2-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1,2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 2.16 (s, 6H), 2.36 (t, J = 6.9 Hz, 2H), 2.84 (t, J = 5.7 Hz, 2H), 3.32 (m, 2H), 3.76 (t, J = 5.7 Hz, 2H), 4.67 (s, 2H), 6.06 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.28 (m, 1H), 7.17 (m, 4H), 7.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 298 (M + H)⁺, 149 ;

25 TL C : R_f 0.34 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0003

N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
アセトアミド

NMR(DMSO-d₆, 373.1K): δ 1.51 (m, 4H), 1.70 (m, 4H), 1.80 (s, 3H), 3.22 (m,
5 2H), 3.32 (m, 2H), 3.56 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 5.85 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 5.97 (m, 1H),
7.52 (m, 1H), 7.73 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 278 (M + H)⁺;

TLC: Rf 0.44 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10 実施例 11-0004

(1R*, 2R*)-N-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-
-イル)ピリミジン-2-イル]シクロヘキサン-1,2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.15 (m, 4H), 1.66 (m, 2H), 1.82 (m, 1H), 1.97 (m, 1H), 2.84
15 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 3.37 (m, 2H), 3.76 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 4.67 (s, 2H), 6.05 (d, J =
6.0 Hz, 1H), 6.35 (m, 1H), 7.17 (m, 4H), 7.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

MS(MALDI-TOF, Pos.): 324 (M + H)⁺;

TLC: Rf 0.41 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0005

20 (1S*, 2R*)-N-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-
-イル)ピリミジン-2-イル]シクロヘキサン-1,2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.27 (m, 2H), 1.51 (m, 6H), 2.83 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 2.98 (m,
1H), 3.77 (m, 3H), 4.66 (s, 2H), 6.04 (m, 2H), 7.18 (m, 4H), 7.80 (d, J = 6.0 Hz,
1H);

25 MS(MALDI-TOF, Pos.): 324 (M + H)⁺;

TLC: Rf 0.36 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0006

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼパン-2-オン

5 NMR(DMSO-d₆, 373K): δ 1.32 (m, 2H), 1.49 (m, 4H), 1.72 (m, 6H), 1.92 (m, 1H), 2.08 (m, 1H), 3.18 (m, 2H), 3.57 (m, 4H), 4.44 (m, 1H), 5.88 (m, 2H), 7.47 (m, 1H), 7.76 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 607 (2M + H)⁺, 304 (M + H)⁺;

TLC: Rf 0.50 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10

実施例 11-0007

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1,3'-
-ビペリジン-3-アミン

15 NMR(DMSO-d₆): δ 1.25 (m, 3H), 1.44 (m, 5H), 1.68 (m, 8H), 2.02 (m, 1H), 2.38 (m, 4H), 2.65 (m, 1H), 2.81 (d, J = 12.30 Hz, 1H), 2.98 (m, 2H), 3.52 (m, 4H), 3.77 (m, 2H), 5.83 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 359 (M + H)⁺, 276;

TLC: Rf 0.21 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

20 実施例 11-0008

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1,4'-
-ビペリジン-3-アミン

25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.29 (m, 3H), 1.46 (m, 5H), 1.70 (m, 8H), 1.95 (m, 1H), 2.16 (m, 1H), 2.30 (m, 1H), 2.42 (m, 2H), 2.64 (m, 1H), 2.97 (m, 3H), 3.52 (m, 4H), 3.78 (m, 2H), 5.83 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 6.12 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 359 (M + H)⁺, 276, 180 (M + 2H)²⁺;

T L C : R f 0.18 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 0 9

2 - [4 - ((1 S*, 2 S*) - 2 - [4 - (3 , 4 - ジヒドロイソキノリン
5 - 2 (1 H) - イル) ピリミジン - 2 - イル] アミノシクロヘキシル) ピペ
ラジン - 1 - イル] エタノール

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.22 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 2.26 (m, 6H), 2.40 (m, 2H), 2.66
(m, 2H), 3.05 (m, 2H), 3.35 (m, 2H), 3.84 (m, 3H), 4.32 (m, 1H), 4.76 (s, 2H), 6.23
(m, 1H), 7.07 (t, J = 7.3 Hz, 1H), 7.19 (m, 4H), 7.32 (d, J = 8.2 Hz, 1H), 7.51 (t, J =
10 7.30 Hz, 1H), 7.81 (d, J = 8.2 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 487 (M + H)⁺, 244 ;

T L C : R f 0.47 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 1 0

15 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(1 - エチルピロリジン - 2 - イル) メチル]
ピリミジン - 2 - アミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.24 (t, J = 7.10 Hz, 3H), 1.54 (m, 4H), 1.75 (m, 4H), 1.80 (m,
2H), 2.01 (m, 2H), 2.50 (m, 2H), 3.07 (m, 1H), 3.56 (m, 8H), 5.83 (d, J = 6.30 Hz,
1H), 6.16 (m, 1H), 7.72 (d, J = 6.30 Hz, 1H) ;

20 M S (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 1 1

N¹ - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - N², N² - ジイソ
25 プロピルエタン - 1 , 2 - ジアミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.10 (d, J = 6.6 Hz, 12H), 1.53 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 2.75 (t, J

= 6.3 Hz, 2H), 3.14 (m, 2H), 3.46 (m, 2H), 3.57 (m, 4H), 5.79 (d, J = 6.3 Hz, 1H),
5.90 (m, 1H), 7.73 (d, J = 6.3 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 320 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

5

実施例 1 1 - 0 0 1 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - (3 - ピロリジン - 1 - イルプロピル) ピリ
ミジン - 2 - アミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.52 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 1.83 (m, 4H), 2.60 (m, 6H), 2.92 (m,
10 2H), 3.42 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 3.54 (m, 4H), 5.25 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.3 Hz, 1H),
7.76 (d, J = 6.3 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.35 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

15

実施例 1 1 - 0 0 1 3

4 - アゼパン - 1 - イル - N - (3 - モルホリン - 4 - イルプロピル) ピリ
ミジン - 2 - アミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.49 (m, 4H), 1.70 (m, 6H), 2.37 (m, 6H), 3.37 (q, J = 6.60 Hz,
20 2H), 3.54 (m, 4H), 3.64 (t, J = 4.70 Hz, 4H), 4.82 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.60 Hz, 1H),
7.59 (d, J = 6.60 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 320 (M + H)⁺, 233 ;

T L C : R f 0.33 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 1 4

25 1 - 3 - [(4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] プロピ
ルピロリジン - 2 - オン

NMR(CDCl₃) : δ 1.53 (m, 4H), 1.76 (m, 4H), 1.80 (m, 2H), 1.99 (m, 2H), 2.35 (t, J = 7.90 Hz, 2H), 3.36 (m, 4H), 3.63 (m, 6H), 5.82 (d, J = 6.60 Hz, 1H), 6.39 (m, 1H), 7.65 (d, J = 6.60 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 318 (M + H)⁺ ;

5 T L C : R f 0.50 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 1 5

4-アゼパン-1-イル-N-[3-(4-メチルピペラジン-1-イル)プロピル]ピリミジン-2-アミン

10 NMR(CDCl₃) : δ 1.53 (m, 4H), 1.75 (m, 6H), 2.27 (s, 3H), 2.45 (m, 8H), 2.64 (m, 2H), 3.40 (m, 2H), 3.55 (m, 4H), 5.48 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.30 Hz, 1H), 7.76 (d, J = 6.30 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 333 (M + H)⁺, 233 ;

T L C : R f 0.25 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

15

実施例 1 1 - 0 0 1 6

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロペンチルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20 NMR(CDCl₃) : δ 1.41 (m, 2H), 1.52 (m, 6H), 1.65 (m, 2H), 1.79 (m, 8H), 1.96 (m, 2H), 2.06 (m, 1H), 2.22 (m, 1H), 2.51 (m, 1H), 2.63 (m, 1H), 3.00 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.01 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 344 (M + H)⁺, 247, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.60 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 1 0 : 1)。

25

実施例 1 1 - 0 0 1 7

N¹ - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - N² - フェニルエ
タン - 1 , 2 - ジアミン

NMR(CDCl₃) : δ 1.55 (s, 4H), 1.76 (m, 4H), 3.35 (t, J = 5.70 Hz, 2H), 3.60 (m,
4H), 3.64 (q, J = 5.70 Hz, 2H), 4.29 (m, 1H), 5.27 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.30 Hz, 1H),
5 6.63 (m, 3H), 7.15 (dd, J = 8.50, 7.10 Hz, 2H), 7.79 (d, J = 6.30 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 312 (M + H)⁺ ;

TLC : Rf 0.45 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

実施例 11-0018

10 1 - [2 - (3 - フェニルイミダゾリジン - 1 - イル) ピリミジン - 4 - イ
ル] アゼパン

NMR(CDCl₃) : δ 1.54 (m, 4H), 1.77 (m, 4H), 3.58 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.59 (m,
4H), 3.92 (t, J = 6.60 Hz, 2H), 4.87 (s, 2H), 5.85 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.69 (d, J =
8.50 Hz, 2H), 6.79 (t, J = 7.10 Hz, 1H), 7.27 (dd, J = 8.50, 7.10 Hz, 2H), 7.91 (d, J =
15 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 324 (M + H)⁺ ;

TLC : Rf 0.35 (AcOEt : hexane = 1 : 2)。

実施例 11-0019

20 N - [4 - (2 , 3 - ジヒドロ - 1 H - インドール - 1 - イル) ピリミジン
- 2 - イル] エタン - 1 , 2 - ジアミン ・ 二塩酸塩

NMR(300 MHz, CD₃OD) : δ 8.42 (brd, J = 8.1 Hz, 1H), 7.92 (d, J = 7.2 Hz, 1H),
7.45-7.27 (m, 2H), 7.18 (m, 1H), 6.51 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.26 (t, J = 8.1 Hz, 2H),
3.94-3.78 (m, 2H), 3.50-3.25 (m, 4H) ;

25 MS(FAB, Pos., Glycerin + m-NBA) : 256 (M + H)⁺, 239, 213 ;

TLC : Rf 0.13 (n-BuOH : AcOH : H₂O = 4 : 2 : 1)。

実施例 1 1-0 0 2 0

N-[4-(3,4-ジヒドロキノリン-1(2H)-イル)ピリミジン-2-イル]エタン-1,2-ジアミン・二塩酸塩

5 NMR(300 MHz, CD₃OD) : δ 7.72 (brd, J = 7.2 Hz, 1H), 7.48-7.22 (m, 4H), 6.64 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 4.20-4.00 (m, 2H), 3.94-3.70 (m, 2H), 3.36-3.18 (m, 2H), 2.79 (t, J = 6.6 Hz, 2H), 2.12-2.00 (m, 2H) ;

MS(FAB, Pos., Glycerin + m-NBA) : 270 (M + H)⁺, 253, 227 ;

TL C : R_f 0.22 (n-BuOH : AcOH : H₂O = 4 : 2 : 1)。

10

実施例 1 1-0 0 2 1

4-アゼパン-1-イル-N-(ピリジン-2-イルメチル)ピリミジン-2-アミン

15 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.34 (m, 4H), 1.63 (m, 4H), 3.52 (m, 4H), 4.48 (d, J = 5.90 Hz, 2H), 5.86 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.97 (m, 1H), 7.17 (m, 1H), 7.24 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.67 (td, J = 7.70, 1.80 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 8.45 (m, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 284 (M + H)⁺ ;

TL C : R_f 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

20 実施例 1 1-0 0 2 2

N¹-(4-アゼパン-1-イル)ピリミジン-2-イル-N²-(ピリジン-2-イルメチル)エタン-1,2-ジアミン

25 NMR(CD₃OD) : δ 1.52 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 2.83 (t, J = 6.20 Hz, 2H), 3.47 (t, J = 6.20 Hz, 2H), 3.53 (m, 4H), 3.90 (s, 2H), 5.91 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.27 (m, 1H), 7.44 (m, 1H), 7.66 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.76 (m, 1H), 8.46 (m, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 327 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.50 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 2 3

N - 2 - [(4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] エチル
5 グアニジン・二塩酸塩

NMR(DMSO-d₆): δ 1.46 (m, 4H), 1.71 (m, 4H), 3.35 (m, 2H), 3.47 (m, 2H), 3.63
(m, 2H), 3.79 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 6.40 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 7.34 (m, 4H), 7.83 (d, J
= 7.30 Hz, 1H), 7.99 (m, 1H), 8.21 (m, 1H), 12.63 (m, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺, 261 ;

10 T L C : R f 0.26 (AcOEt : AcOH : H₂O = 3 : 1 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 2 4

2 - [(4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] - N, N,
N - トリメチルエタナミニウム ヨージド

15 NMR(DMSO-d₆): δ 1.46 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 3.11 (s, 9H), 3.41 (m, 2H), 3.51
(m, 4H), 3.68 (m, 2H), 5.94 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.72 (m, 1H), 7.77 (d, J = 6.00 Hz,
1H) ;

M S (MALDI-TOF, Pos.) : 278 (M⁺), 233, 219 ;

T L C : R f 0.10 (AcOEt : AcOH : H₂O = 3 : 1 : 1)。

20

実施例 1 1 - 0 0 2 5

N - [4 - (3, 6 - ジヒドロピリジン - 1 (2 H) - イル) ピリミジン -
2 - イル] エタン - 1, 2 - ジアミン・二塩酸塩

25 NMR(DMSO-d₆): δ 2.19 (m, 2H), 2.98 (m, 2H), 3.64 (m, 2H), 3.77 (m, 1H), 3.98
(m, 1H), 4.12 (m, 1H), 4.34 (m, 1H), 5.77 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 5.94 (m, 1H), 6.58
(m, 1H), 7.88 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 8.40 (m, 4H), 12.64 (m, 1H) ;

M S (MALDI-TOF, Pos.) : 220 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.49 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 2 0 : 4)。

実施例 1 1 - 0 0 2 6

5 N - [4 - (1 , 4 ' - ピペリジン - 1 ' - イル) ピリミジン - 2 - イル]
エタン - 1 , 2 - ジアミン・三塩酸塩

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.39 (m, 1H), 1.73 (m, 5H), 1.95 (m, 2H), 2.26 (m, 2H), 2.93
(m, 5H), 3.18 (m, 1H), 3.38 (m, 2H), 3.46 (m, 1H), 3.64 (q, J = 6.00 Hz, 2H), 4.35
(m, 2H), 5.10 (m, 1H), 6.61 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 7.90 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 8.28 (m,
10 3H), 11.04 (m, 1H), 12.68 (m, 1H) ;

M S (MALDI-TOF, Pos.) : 305 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.39 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 2 0 : 4)。

実施例 1 1 - 0 0 2 7

15 N - (4 - ピペリジン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) エタン - 1 , 2 -
ジアミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 4H), 1.63 (m, 2H), 2.91 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.41
(m, 2H), 3.52 (m, 4H), 6.06 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.59 (m, 1H), 7.80 (m, 3H) ;

M S (LC-MS, APCI, Pos. 20 V) : 222 (M + H)⁺, 179 ;

20 T L C : R f 0.48 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 2 0 : 4)。

実施例 1 1 - 0 0 2 8

N¹ - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - N² - イソプロピ
ルエタン - 1 , 2 - ジアミン

25 N M R (DMSO-d₆) : δ 0.94 (d, J = 6.20 Hz, 6H), 1.42 (m, 4H), 1.67 (m, 4H), 2.62
(m, 2H), 2.68 (m, 1H), 3.24 (m, 2H), 3.62 (m, 4H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.26

(m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺ ;

TLC : Rf 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 20 : 4)。

5 実施例 11-0029

4-アゼパン-1-イル-N- (1-イソプロピルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.98 (m, 6H), 1.45 (m, 5H), 1.62 (m, 5H), 2.05 (m, 1H), 2.30
(m, 2H), 2.54 (m, 1H), 2.84 (t, J = 7.90 Hz, 1H), 3.60 (m, 4H), 4.16 (m, 1H), 5.83 (d,
10 J = 5.90 Hz, 1H), 6.39 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺, 262 ;

TLC : Rf 0.19 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0030

15 4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-エチルプロピル) ピロリジン-
3-イル] ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.80 (m, 6H), 1.33 (m, 4H), 1.47 (m, 5H), 1.64 (m, 4H), 2.03
(m, 2H), 2.30 (dd, J = 9.00, 5.70 Hz, 1H), 2.55 (m, 2H), 2.88 (t, J = 7.90 Hz, 1H),
3.60 (m, 4H), 4.17 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 6.39 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.20
20 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 332 (M + H)⁺, 262, 193 ;

TLC : Rf 0.26 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0031

25 4-アゼパン-1-イル-N- (1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.15 (m, 5H), 1.47 (m, 5H), 1.60 (m, 7H), 1.79 (m, 2H), 2.02 (m, 2H), 2.32 (dd, $J = 9.20, 5.50$ Hz, 1H), 2.55 (m, 2H), 2.86 (t, $J = 8.10$ Hz, 1H), 3.59 (m, 4H), 4.17 (m, 1H), 5.83 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H), 6.38 (m, 1H), 7.71 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H) ;

5 MS(ESI, Pos. 20 V) : 344 (M + H)⁺, 262 ;

TLC : R_f 0.26 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0032

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-ベンジルピロリジン-3-イ
10 ル]ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.53 (m, 4H), 1.73 (m, 5H), 2.31 (m, 1H), 2.49 (m, 2H), 2.70 (m, 1H), 2.90 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.63 (s, 2H), 4.45 (m, 1H), 5.44 (m, 1H), 5.79 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H), 7.30 (m, 5H), 7.74 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺, 262, 192 ;

15 TLC : R_f 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0033

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルピロリジン-3-イ
ル]ピリミジン-2-アミン

20 オイル状物質 ;

NMR(CDCl₃): δ 1.53 (m, 4H), 1.72 (m, 5H), 2.33 (m, 1H), 2.51 (m, 2H), 2.70 (m, 1H), 2.90 (dd, $J = 9.50, 6.60$ Hz, 1H), 3.58 (m, 4H), 3.63 (s, 2H), 4.46 (m, 1H), 5.37 (m, 1H), 5.79 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H), 7.32 (m, 5H), 7.75 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺, 262, 192 ;

25 TLC : R_f 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0034

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.54 (m, 4H), 1.74 (m, 5H), 2.33 (m, 1H), 2.59 (m, 2H), 2.78 (m,
5 1H), 2.96 (m, 1H), 3.57 (m, 4H), 3.76 (d, J = 13.60 Hz, 1H), 3.82 (d, J = 13.60 Hz,
1H), 4.50 (m, 1H), 5.80 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 5.81 (m, 1H), 7.15 (m, 1H), 7.43 (d, J =
7.70 Hz, 1H), 7.65 (td, J = 7.70, 1.80 Hz, 1H), 7.72 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 8.54 (m,
1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 353 (M + H)⁺, 177 (M + 2H)²⁺;

10 TLC: Rf 0.30 (AcOEt: MeOH: TEA = 20:2:1)。

実施例 11-0035

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピロリ
ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 NMR(CDCl₃): δ 0.86 (t, J = 7.30 Hz, 6H), 1.36 (m, 5H), 1.54 (m, 4H), 1.75 (m,
5H), 2.29 (m, 3H), 2.46 (m, 2H), 2.67 (m, 1H), 2.83 (m, 1H), 3.57 (m, 4H), 4.45 (m,
1H), 5.26 (m, 1H), 5.79 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.20 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 346 (M + H)⁺, 289, 262;

TLC: Rf 0.50 (AcOEt: MeOH: TEA = 20:2:1)。

20

実施例 11-0036

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(シクロヘキシルメチル)ピ
ロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25 NMR(CDCl₃): δ 0.88 (m, 2H), 1.20 (m, 4H), 1.45 (m, 1H), 1.54 (m, 4H), 1.75 (m,
9H), 2.27 (m, 3H), 2.47 (m, 2H), 2.68 (m, 1H), 2.87 (m, 1H), 3.58 (m, 4H), 4.46 (m,
1H), 5.28 (m, 1H), 5.80 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 6.20 Hz, 1H);

M S (ESI, Pos. 20 V) : 358 (M + H)⁺, 262 ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0037

- 5 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 0.81 (m, 6H), 1.26 (m, 6H), 1.45 (m, 4H), 1.63 (m, 4H), 2.07 (m, 1H), 2.21 (m, 3H), 2.43 (m, 2H), 2.79 (m, 1H), 3.43 (m, 4H), 4.19 (m, 1H), 5.84 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.40 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

- 10 M S (ESI, Pos. 20 V) : 346 (M + H)⁺, 262, 173.5 (M + 2H)⁺ ;

T L C : R f 0.28 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0038

- 15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(シクロヘキシルメチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 0.82 (m, 2H), 1.14 (m, 3H), 1.35 (m, 1H), 1.43 (m, 4H), 1.65 (m, 10H), 2.05 (m, 1H), 2.15 (m, 2H), 2.24 (m, 1H), 2.40 (m, 2H), 2.74 (m, 1H), 3.52 (m, 4H), 4.19 (m, 1H), 5.84 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.45 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

- 20 M S (ESI, Pos. 20 V) : 358 (M + H)⁺, 179.5 (M + 2H)⁺ ;

T L C : R f 0.37 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0040

- 25 4-アゼパン-1-イル-N-(1-テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イル)ピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.28 (m, 2H), 1.47 (m, 4H), 1.69 (m, 6H), 2.07 (m, 2H), 2.33

(m, 1H), 2.61 (m, 1H), 2.86 (m, 1H), 3.31 (m, 4H), 3.39 (m, 4H), 3.84 (m, 2H), 4.21 (m, 1H), 5.84 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.39 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 346 (M + H)⁺, 290 ;

TL C : R f 0.44 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

5

実施例 1 1 - 0 0 4 1

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.16 (m, 5H), 1.50 (m, 5H), 1.67 (m, 7H), 1.83 (m, 2H), 2.07 (m, 3H), 2.70 (m, 2H), 2.98 (m, 1H), 3.63 (m, 4H), 4.22 (m, 1H), 5.86 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.43 (m, 1H), 7.72 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 344 (M + H)⁺, 262 ;

TL C : R f 0.39 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

15

実施例 1 1 - 0 0 4 2

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.42 (m, 4H), 1.67 (m, 5H), 1.93 (m, 1H), 2.66 (dd, J = 11.10, 4.50 Hz, 1H), 2.76 (m, 1H), 2.94 (m, 2H), 3.81 (m, 4H), 4.23 (m, 1H), 5.85 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.48 (m, 1H), 7.72 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 262 (M + H)⁺, 131.5 (M + 2H)²⁺ ;

TL C : R f 0.20 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

20

実施例 1 1 - 0 0 4 3

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-シクロヘキシルアゼパン-3-アミン

25

NMR(DMSO- d_6): δ 1.18 (m, 4H), 1.40 (m, 5H), 1.56 (m, 5H), 1.72 (m, 8H), 2.33 (m, 2H), 2.69 (m, 5H), 3.57 (m, 4H), 3.86 (m, 1H), 5.81 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H), 5.95 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.20$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 ($M + H$)⁺, 290, 186.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

5 TLC : R_f 0.47 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0044

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-テ
トラヒドロ-2H-ピラン-4-イルアゼパン-3-アミン

10 NMR(DMSO- d_6): δ 1.37 (m, 7H), 1.68 (m, 11H), 2.70 (m, 5H), 3.17 (m, 2H), 3.55 (m, 4H), 3.85 (m, 3H), 5.82 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 6.01 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 374 ($M + H$)⁺, 316, 290, 187.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : R_f 0.50 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15

実施例 11-0045

4-アゼパン-1-イル-N-シクロヘブチルピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.46 (m, 12H), 1.69 (m, 6H), 1.85 (m, 2H), 3.52 (m, 4H), 3.77 (m, 1H), 5.80 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 6.26 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H) ;

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 577 ($2M + H$)⁺, 289 ($M + H$)⁺ ;

TLC : R_f 0.41 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

実施例 11-0046

(3S)-1'-アセチル-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2
25 -イル)-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.30 (m, 8H), 1.71 (m, 8H), 1.94 (m, 3H), 2.04 (m, 1H), 2.24

(m, 2H), 2.48 (m, 1H), 2.69 (m, 1H), 2.96 (m, 2H), 3.48 (m, 4H), 3.76 (m, 2H), 4.33 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.19 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 401 (M + H)⁺, 276, 201 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.52 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

5

実施例 1 1 - 0 0 4 7

(3 S) - 1' - アセチル - N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.22 (m, 3H), 1.46 (m, 5H), 1.71 (m, 8H), 1.95 (s, 3H), 2.02 (m, 1H), 2.21 (m, 1H), 2.42 (m, 2H), 2.66 (m, 1H), 2.96 (m, 2H), 3.52 (m, 4H), 3.80 (m, 2H), 4.38 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.09 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 401 (M + H)⁺, 201 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.46 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

15

実施例 1 1 - 0 0 4 8

(3 S) - N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (メチルスルホニル) - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.28 (m, 3H), 1.47 (m, 5H), 1.64 (m, 5H), 1.82 (m, 3H), 2.04 (m, 1H), 2.25 (m, 1H), 2.48 (m, 4H), 2.71 (m, 1H), 2.82 (s, 3H), 2.98 (m, 1H), 3.50 (m, 5H), 3.78 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.14 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 437 (M + H)⁺, 276, 219 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.54 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

25

実施例 1 1 - 0 0 4 9

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-
(メチルスルホニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.27 (m, 3H), 1.44 (m, 6H), 1.63 (m, 5H), 1.79 (m, 3H), 1.99
(m, 1H), 2.18 (m, 1H), 2.35 (t, J = 11.10 Hz, 1H), 2.67 (t, J = 11.10 Hz, 3H), 2.82 (s,
5 3H), 2.98 (m, 1H), 3.52 (m, 5H), 3.80 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.09 (m,
1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 873 (2M + H)⁺, 437 (M + H)⁺, 219 (M + 2H)²⁺;

TLC: Rf 0.63 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10 実施例 11-0050

1-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミ
ノ]ピペリジン-1-イルシクロヘキサンカルボニトリル

NMR(DMSO- d_6): δ 1.29 (m, 3H), 1.47 (m, 6H), 1.69 (m, 9H), 1.88 (m, 1H),
2.07 (m, 3H), 2.90 (m, 1H), 3.15 (m, 3H), 3.53 (m, 4H), 3.83 (m, 1H), 5.84 (d, J =
15 6.00 Hz, 1H), 6.25 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 765 (2M + H)⁺, 383 (M + H)⁺, 356, 276;

TLC: Rf 0.26 (AcOEt)。

実施例 11-0051

20 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(1-メチルシクロヘキシル)
ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 0.77 (s, 3H), 1.18 (m, 6H), 1.44 (m, 7H), 1.67 (m, 9H), 1.88
(m, 1H), 2.07 (m, 1H), 2.70 (m, 1H), 2.99 (m, 1H), 3.53 (m, 4H), 3.81 (m, 1H), 5.82
(d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.08 (m, 1H), 7.70 (d, J = 5.90 Hz, 1H);

25 MS(ESI, Pos. 20 V): 372 (M + H)⁺, 276;

TLC: Rf 0.67 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0052

4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサノン

5 NMR(DMSO- d_6): δ 1.41 (m, 6H), 1.63 (m, 5H), 1.83 (m, 4H), 2.00 (m, 1H), 2.22 (m, 2H), 2.38 (m, 3H), 2.96 (m, 4H), 3.60 (m, 4H), 3.98 (m, 1H), 6.05 (m, 1H), 6.98 (m, 1H), 7.76 (d, $J = 6.60$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 ($M + H$)⁺, 290, 186.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : Rf 0.67 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

10

実施例 11-0053

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(3-メチルシクロヘキシル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

15 NMR(DMSO- d_6 , 373 K) : δ 0.88 (m, 3H), 1.16 (m, 1H), 1.27 (m, 1H), 1.38 (m, 4H), 1.50 (m, 8H), 1.63 (m, 2H), 1.70 (m, 4H), 1.92 (m, 1H), 2.09 (m, 1H), 2.22 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.55 (t, $J = 6.00$ Hz, 4H), 3.83 (m, 1H), 5.54 (d, $J = 8.40$ Hz, 1H), 5.83 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 7.72 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 ($M + H$)⁺, 276, 186.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : Rf 0.42 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

20

実施例 11-0054

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(3, 5-ジメチルシクロヘキシル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

25 NMR(DMSO- d_6): δ 0.53 (m, 2H), 0.80 (m, 6H), 1.45 (m, 8H), 1.65 (m, 8H), 1.83 (m, 2H), 2.17 (m, 1H), 2.48 (m, 2H), 2.70 (m, 1H), 2.93 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.77 (m, 1H), 5.82 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺, 276, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : R_f 0.47 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0055

5 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(3,4-ジメチルシクロペンチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.86 (m, 6H), 1.05 (m, 2H), 1.29 (m, 4H), 1.45 (m, 4H), 1.66 (m, 8H), 1.89 (m, 2H), 2.58 (m, 2H), 2.96 (m, 1H), 3.49 (m, 4H), 3.73 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.06 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

10 MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 276, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : R_f 0.42 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0056

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘプチルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 14H), 1.66 (m, 10H), 1.97 (m, 1H), 2.18 (m, 1H), 2.45 (m, 2H), 2.86 (m, 1H), 3.51 (m, 4H), 3.71 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.00 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 276, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

20 TLC : R_f 0.42 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0057

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(3,5-ジメチルシクロヘキシル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25 NMR(DMSO-d₆) : δ 0.47 (m, 2H), 0.81 (m, 6H), 1.45 (m, 6H), 1.67 (m, 10H), 2.04 (m, 1H), 2.21 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.58 (m, 1H), 2.90 (m, 1H), 3.50 (m, 4H),

4.17 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.35 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 262 ;

T L C : R f 0.42 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

5 実施例 1 1 - 0 0 5 8

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - エチルピペリジン - 3 - イル]
ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.96 (t, J = 7.00 Hz, 3H), 1.28 (m, 1H), 1.44 (m, 5H), 1.66
(m, 6H), 1.91 (m, 1H), 2.28 (m, 2H), 2.48 (m, 1H), 2.58 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.51
10 (m, 4H), 3.77 (m, 1 H) 5.83 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.05 (m, 1H), 7.71 (d, J = 5.90 Hz,
1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺, 152.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.40 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

15 実施例 1 1 - 0 0 5 9

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [1 - (1 - エチルシクロヘキシル) ピペリ
ジン - 3 - イル] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.75 (t, J = 7.50 Hz, 3H), 1.30 (m, 9H), 1.45 (m, 6H), 1.69
(m, 9H), 1.96 (m, 1H), 2.16 (m, 1H), 2.73 (m, 1H), 2.99 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.74
20 (m, 1H), 5.81 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.04 (m, 1H), 7.69 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺, 276, 111 ;

T L C : R f 0.38 (CHCl₃ : MeOH = 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 6 0

25 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [1 - (1 - フェニルシクロヘキシル) ピペ
リジン - 3 - イル] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.04 (m, 1H), 1.29 (m, 5H), 1.46 (m, 5H), 1.65 (m, 9H), 1.87 (m, 2H), 2.12 (m, 2H), 2.69 (m, 1H), 2.98 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.77 (m, 1H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 7.19 (m, 1H), 7.29 (m, 4H), 7.69 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

- 5 MS(ESI, Pos. 20 V): 434 (M + H)⁺, 276, 159;
 T L C : R f 0.38 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

実施例 11-0061

- 10 N- (1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル) -4-(1,4-オキサゼパン-4-イル) ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.02 (m, 1H), 1.20 (m, 2H), 1.50 (m, 3H), 1.78 (m, 8H), 1.96 (m, 2H), 2.26 (m, 2H), 2.46 (m, 1H), 2.53 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.68 (m, 4H), 3.76 (m, 4H), 3.95 (m, 1H), 5.10 (d, J = 9.30 Hz, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

- 15 MS(ESI, Pos. 20 V): 360 (M + H)⁺, 278, 180.5 (M + 2H)⁺;
 T L C : R f 0.38 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0062

- 20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-(シクロペンチルアセチル) -1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.11 (m, 3H), 1.26 (m, 2H), 1.51 (m, 9H), 1.71 (m, 10H), 1.93 (m, 1H), 2.06 (m, 1H), 2.18 (m, 1H), 2.27 (m, 2H), 2.41 (m, 2H), 2.68 (m, 1H), 2.93 (m, 2H), 3.50 (m, 4H), 3.72 (m, 1H), 3.89 (m, 1H), 4.43 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

- 25 MS(ESI, Pos. 20 V): 469 (M + H)⁺, 359, 235 (M + 2H)²⁺, 180;
 T L C : R f 0.66 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0063

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(tert-ブチル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

5 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.21 (s, 9H), 1.30 (m, 3H), 1.45 (m, 5H), 1.67 (m, 8H), 1.96 (m, 1H), 2.15 (m, 1H), 2.37 (m, 3H), 2.68 (m, 1H), 2.96 (m, 1H), 3.52 (m, 4H), 3.76 (m, 1H), 3.98 (m, 2H), 5.68 (s, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.13 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 458 (M + H)⁺, 276, 180 ;

10 TLC : R_f 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0064

イソプロピル 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキシレート

15 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.15 (d, J = 6.20 Hz, 6H), 1.27 (m, 3H), 1.45 (m, 5H), 1.69 (m, 8H), 1.97 (m, 1H), 2.19 (m, 1H), 2.38 (m, 1H), 2.72 (m, 3H), 3.00 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.74 (m, 1H), 3.99 (m, 2H), 4.74 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 6.15 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 445 (M + H)⁺, 359, 276, 202 ;

20 TLC : R_f 0.57 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0065

(3S) -N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-(シクロヘキシルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

25 非結晶物質 ;

NMR(CDCl₃) : δ 1.24 (m, 4H), 1.52 (m, 8H), 1.71 (m, 15H), 2.25 (m, 1H), 2.47

(m, 4H), 2.95 (m, 2H), 3.55 (m, 4H), 3.96 (m, 2H), 4.64 (m, 1H), 5.01 (m, 1H), 5.75 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 469 (M + H)⁺, 359, 318, 212, 111 ;

T L C : R f 0.48 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

5

実施例 11-0066

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロペンチルカルボニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.20 (m, 4H), 1.44 (m, 7H), 1.69 (m, 14H), 1.96 (m, 1H),
10 2.20 (m, 1H), 2.40 (m, 1H), 2.68 (m, 1H), 2.96 (m, 3H), 3.51 (m, 4H), 3.76 (m, 1H),
4.03 (m, 1H), 4.45 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.16 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00
Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 455 (M + H)⁺, 359 ;

T L C : R f 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15

実施例 11-0067

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-メチルブタノイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.77 (t, J = 7.40 Hz, 3H), 0.94 (m, 3H), 1.19 (m, 5H), 1.46
20 (m, 6H), 1.71 (m, 8H), 1.97 (m, 1H), 2.20 (m, 1H), 2.39 (m, 1H), 2.66 (m, 2H), 3.00
(m, 2H), 3.50 (m, 4H), 3.75 (m, 1H), 4.01 (m, 1H), 4.46 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz,
1H), 6.15 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 443 (M + H)⁺, 359 ;

T L C : R f 0.51 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

25

実施例 11-0068

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロペンチルアセチル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.05 (m, 3H), 1.28 (m, 3H), 1.47 (m, 8H), 1.71 (m, 11H), 1.95 (m, 1H), 2.08 (m, 1H), 2.19 (m, 1H), 2.28 (m, 2H), 2.41 (m, 1H), 2.68 (m, 1H),
 5 2.96 (m, 2H), 3.51 (m, 4H), 3.73 (m, 1H), 3.93 (m, 1H), 4.39 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.12 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 469 (M + H)⁺, 359, 180;

TLC: R_f 0.53 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10 実施例 11-0069

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3-フルオロベンゾイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.36 (m, 9H), 1.67 (m, 8H), 2.01 (m, 1H), 2.24 (m, 2H), 2.71 (m, 2H), 3.02 (m, 2H), 3.51 (m, 4H), 3.79 (m, 1H), 4.50 (m, 1H), 5.85 (d, J = 6.00
 15 Hz, 1H), 6.22 (m, 1H), 7.22 (m, 3H), 7.47 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 481 (M + H)⁺, 359, 241 (M + 2H)²⁺, 123;

TLC: R_f 0.62 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0070

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(ピペリジン-1-イルカルボニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.23 (m, 3H), 1.47 (m, 11H), 1.70 (m, 8H), 1.96 (m, 1H), 2.21 (m, 1H), 2.38 (m, 2H), 2.63 (m, 3H), 2.91 (m, 1H), 3.10 (m, 4H), 3.52 (m, 5H), 3.79 (m, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.14 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

25 MS(ESI, Pos. 20 V): 470 (M + H)⁺, 359, 112;

TLC: R_f 0.65 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0071

4-アゼパン-1-イル-N-(3-ピペリジン-1-イルシクロヘキシル)
ピリミジン-2-アミン

5 NMR(DMSO-d₆): δ 1.31 (m, 3H), 1.49 (m, 13H), 1.69 (m, 6H), 2.38 (m, 5H),
3.54 (m, 4H), 4.10 (m, 1H), 5.81 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.07 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00
Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 358 (M + H)⁺, 179.5 (M + 2H)²⁺;

TLC: R_f 0.74 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10

実施例 11-0072

4-アゼパン-1-イル-N-(1,4-トランス-4-ピペリジン-1-
イルシクロヘキシル)ピリミジン-2-アミン

15 NMR(DMSO-d₆): δ 1.18 (m, 3H), 1.33 (m, 3H), 1.47 (m, 8H), 1.69 (m, 6H), 1.94
(m, 2H), 2.20 (m, 1H), 2.42 (m, 4H), 3.57 (m, 5H), 5.81 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.14
(m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 715 (2M + H)⁺, 358 (M + H)⁺, 179.5 (M + 2H)²⁺;

TLC: R_f 0.45 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

20 実施例 11-0073

4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミ
ノ]ピペリジン-1-イルシクロヘキサカルボン酸・二塩酸塩

25 NMR(CD₃OD): δ 1.61 (m, 8H), 1.86 (m, 5H), 2.23 (m, 7H), 2.69 (m, 1H), 2.84
(m, 1H), 3.05 (m, 1H), 3.51 (m, 1H), 3.72 (m, 4H), 3.96 (m, 2H), 4.47 (m, 1H), 6.43
(d, J = 7.50 Hz, 1H), 7.69 (d, J = 7.50 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 402 (M + H)⁺, 304, 276, 201.5 (M + 2H)²⁺;

T L C : R f 0.64 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 7 4

1, 4-トランス-4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサノール

NMR(DMSO-d₆): δ 1.12 (m, 5H), 1.42 (m, 5H), 1.63 (m, 8H), 1.79 (m, 2H), 1.94 (m, 1H), 2.22 (m, 2H), 2.64 (m, 1H), 2.92 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.77 (m, 2H), 4.44 (d, J = 4.20 Hz, 1H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

10 M S (FAB, Pos.) : 374 (M + H)⁺;

T L C : R f 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 7 5

4-アゼパン-1-イル-N-[(1R*, 2R*)-2-ピペリジン-1-イルシクロヘキシル] ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.09 (m, 5H), 1.32 (m, 6H), 1.45 (m, 4H), 1.63 (m, 6H), 1.83 (m, 1H), 2.31 (m, 5H), 3.57 (m, 5H), 5.74 (d, J = 4.80 Hz, 1H), 5.84 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

M S (ESI, Pos. 20 V) : 358 (M + H)⁺, 179.5 (M + 2H)²⁺;

20 T L C : R f 0.43 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 7 6

1, 4-シス-4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサノール

25 非結晶物質;

NMR(DMSO-d₆): δ 1.29 (m, 7H), 1.46 (m, 4H), 1.68 (m, 9H), 1.95 (m, 1H), 2.22

(m, 2H), 2.64 (m, 1H), 2.95 (m, 1H), 3.49 (m, 4H), 3.77 (m, 2H), 4.22 (d, J = 3.30 Hz, 1H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.13 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (FAB, Pos.) : 374 (M + H)⁺ ;

TLC : R_f 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

5

実施例 11-0077

1-2-[(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル) アミノ] ピリミジン-4-イルアゼパン-4-オール

10 NMR(DMSO-d₆) : δ 1.08 (m, 6H), 1.49 (m, 7H), 1.72 (m, 5H), 1.84 (m, 2H), 2.01 (m, 1H), 2.24 (m, 2H), 2.63 (m, 1H), 2.98 (m, 1H), 3.48 (m, 4H), 3.64 (m, 1H), 3.79 (m, 1H), 4.49 (d, J = 3.80 Hz, 1H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.71 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 374 (M + H)⁺, 292, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : R_f 0.46 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15

実施例 11-0078

(4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) (シクロヘキシル) メタノン

20 NMR(CDCl₃) : δ 1.27 (m, 4H), 1.53 (m, 10H), 1.74 (m, 11H), 1.92 (m, 4H), 2.04 (m, 1H), 2.26 (m, 2H), 2.46 (m, 4H), 2.91 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.98 (m, 1H), 5.05 (m, 1H), 5.75 (m, 1H), 7.78 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 468 (M + H)⁺, 276, 234.5 (M + 2H)²⁺, 193 ;

TLC : R_f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

25 実施例 11-0079

N¹-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-N²-シクロヘキ

シル-N²-エチルエタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 0.95 (t, J = 7.00 Hz, 3H), 1.16 (m, 5H), 1.41 (m, 4H), 1.54 (m, 1H), 1.74 (m, 8H), 2.37 (m, 5H), 3.17 (m, 2H), 3.62 (m, 4H), 5.81 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.17 (m, 1H), 7.69 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 346 (M + H)⁺, 264, 173.5 (M + 2H)²⁺ ;

TL C : R f 0.44 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 8 0

10 N¹- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N²-シクロヘキシルエタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 0.92 (m, 2H), 1.19 (m, 3H), 1.45 (m, 5H), 1.63 (m, 6H), 1.79 (m, 2H), 2.27 (m, 1H), 2.65 (t, J = 6.50 Hz, 2H), 3.20 (m, 2H), 3.62 (m, 4H), 5.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.25 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (FAB, Pos.) : 318 (M + H)⁺, 219, 206, 193 ;

15 TL C : R f 0.49 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 1 - 0 0 8 1

20 N¹- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N²-シクロヘキシル-N²-メチルエタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.14 (m, 5H), 1.44 (m, 4H), 1.54 (m, 1H), 1.71 (m, 8H), 2.19 (s, 3H), 2.30 (m, 2H), 2.42 (m, 1H), 3.18 (m, 2H), 3.62 (m, 4H), 5.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.11 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 332 (M + H)⁺, 250 ;

TL C : R f 0.42 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

25

実施例 1 1 - 0 0 8 2

$N^1-(4\text{-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル})-N^2\text{-メチル-}N^2\text{-テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イルエタン-1,2-ジアミン}$

NMR(DMSO- d_6): δ 1.38 (dd, $J = 12.40, 4.50$ Hz, 1H), 1.45 (m, 5H), 1.65 (m, 6H), 2.20 (s, 3H), 2.42 (m, 1H), 2.53 (m, 2H), 3.23 (m, 4H), 3.55 (m, 4H), 3.85 (dd, $J = 11.10, 4.10$ Hz, 2H), 5.83 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 6.15 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 334 ($M + H$)⁺, 276, 250;

TLC: Rf 0.52 ($CHCl_3$: MeOH: $NH_4OH = 80 : 10 : 1$)。

10 実施例 11-0083

$(1R^*, 2S^*)-N^1-(4\text{-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル})-N^2\text{-シクロヘキシルシクロヘキサン-1,2-ジアミン}$

NMR(DMSO- d_6): δ 0.83 (m, 1H), 1.09 (m, 4H), 1.25 (m, 3H), 1.44 (m, 8H), 1.70 (m, 10H), 2.34 (m, 1H), 2.87 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.83 (m, 1H), 5.78 (m, 1H), 5.83 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 372 ($M + H$)⁺, 290, 186.5 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: Rf 0.54 ($CHCl_3$: MeOH: $NH_4OH = 80 : 10 : 1$)。

実施例 11-0084

20 $(1R^*, 2R^*)-N^1-(4\text{-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル})-N^2\text{-シクロヘキシルシクロヘキサン-1,2-ジアミン}$

NMR(DMSO- d_6): δ 0.99 (m, 8H), 1.42 (m, 6H), 1.64 (m, 10H), 1.86 (m, 2H), 2.41 (m, 3H), 3.49 (m, 4H), 5.82 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H), 6.10 (m, 1H), 7.70 (d, $J = 6.00$ Hz, 1H);

25 MS(ESI, Pos. 20 V): 372 ($M + H$)⁺, 290, 186.5 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: Rf 0.54 ($CHCl_3$: MeOH: $NH_4OH = 80 : 10 : 1$)。

実施例 11-0085

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-1, 4'-
-ビピペリジン-1'-イル酢酸・二塩酸塩

5 NMR(CD₃OD) : δ 1.61 (m, 4H), 1.86 (m, 5H), 2.14 (m, 3H), 2.24 (m, 2H), 2.49
(m, 2H), 2.92 (m, 1H), 3.06 (m, 1H), 3.23 (m, 1H), 3.65 (m, 5H), 3.81 (m, 3H), 4.00
(m, 1H), 4.09 (m, 1H), 4.14 (s, 2H), 4.59 (m, 1H), 6.43 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.69 (d,
J = 7.70 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 833 (2M + H)⁺, 417 (M + H)⁺, 276, 209 (M + 2H)²⁺ ;

10 TLC : R_f 0.22 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 20 : 5 : 1)。

実施例 11-0086

3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-1,
4'-ビピペリジン-1'-イルプロピオン酸・二塩酸塩

15 NMR(CD₃OD) : δ 1.61 (m, 4H), 1.83 (m, 5H), 2.12 (m, 3H), 2.24 (m, 2H), 2.49
(m, 2H), 2.88 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.17 (m, 2H), 3.44 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.69 (m,
8H), 3.98 (m, 2H), 4.07 (m, 1H), 4.56 (m, 1H), 6.43 (d, J = 7.50 Hz, 1H), 7.69 (d, J =
7.50 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 431 (M + H)⁺, 304, 276, 216 (M + 2H)²⁺, 156 ;

20 TLC : R_f 0.22 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 20 : 5 : 1)。

実施例 11-0087

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-1,
4'-ビピペリジン-1'-イル酪酸・二塩酸塩

25 NMR (CD₃OD) : δ 1.62 (m, 4H), 1.86 (m, 5H), 2.14 (m, 5H), 2.48 (m, 4H), 2.90
(m, 1H), 3.12 (m, 4H), 3.72 (m, 9H), 3.99 (m, 2H), 4.07 (m, 1H), 4.56 (m, 1H), 6.43

(d, J = 8.10 Hz, 1H), 7.69 (d, J = 8.10 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 445 (M + H)⁺, 276, 223 (M + 2H)²⁺, 170 ;

TLC : Rf 0.22 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 20 : 5 : 1)。

5 実施例 11-0088

メチル (4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) アセタート

NMR(CDCl₃) : δ 1.01 (m, 1H), 1.28 (m, 1H), 1.54 (m, 9H), 1.74 (m, 8H), 1.92 (m, 2H), 2.10 (m, 1H), 2.24 (m, 3H), 2.49 (m, 2H), 2.90 (m, 1H), 3.57 (m, 4H), 3.66 (s, 3H), 3.99 (m, 1H), 5.15 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 7.79 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 430 (M + H)⁺, 276, 215.5 (M + 2H)²⁺, 123 ;

TLC : Rf 0.48 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

15 実施例 11-0089

メチル 3-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) プロパノアート

NMR(CDCl₃) : δ 0.93 (m, 1H), 1.24 (m, 1H), 1.54 (m, 11H), 1.74 (m, 8H), 2.00 (m, 2H), 2.28 (m, 4H), 2.48 (m, 2H), 2.91 (m, 1H), 3.58 (m, 4H), 3.67 (s, 3H), 3.99 (m, 1H), 5.12 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 7.79 (m, 1H) ;

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 444 (M + H)⁺, 276, 222.5 (M + 2H)²⁺, 137 ;

TLC : Rf 0.48 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

25 実施例 11-0090

(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) 酢酸・塩酸塩

NMR(CD₃OD) : δ 1.18 (m, 1H), 1.61 (m, 4H), 1.85 (m, 6H), 1.97 (m, 2H), 2.17

(m, 6H), 2.42 (m, 2H), 2.86 (m, 1H), 3.04 (m, 1H), 3.24 (m, 1H), 3.53 (m, 1H), 3.70 (m, 3H), 3.83 (m, 1H), 3.92 (m, 1H), 4.05 (m, 1H), 4.52 (m, 1H), 5.00 (d, J = 4.80 Hz, 1H), 6.43 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.70 (d, J = 7.70 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 416 (M + H)⁺, 276, 208.5 (M + 2H)²⁺, 123 ;

5 TLC : R f 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 20 : 5 : 1)。

実施例 11-0091

3- (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
 ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) プロピオン酸・塩酸塩

10 NMR(CD₃OD) : δ 1.10 (m, 1H), 1.62 (m, 4H), 1.86 (m, 10H), 2.23 (m, 6H), 2.49 (t, J = 8.20 Hz, 2H), 2.85 (m, 1H), 3.04 (m, 1H), 3.24 (m, 1H), 3.56 (m, 1H), 3.72 (m, 2H), 3.84 (m, 2H), 3.97 (m, 3H), 4.48 (m, 1H), 6.43 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.69 (d, J = 7.70 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 430 (M + H)⁺, 276, 215.5 (M + 2H)²⁺, 138 ;

15 TLC : R f 0.53 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 20 : 5 : 1)。

実施例 11-0092

3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N, N-
 ジメチル-1, 4'-ビピペリジン-1'-スルホンアミド

20 NMR(CDCl₃) : δ 1.55 (m, 8H), 1.75 (m, 8H), 2.27 (m, 1H), 2.38 (m, 1H), 2.47 (m, 1H), 2.57 (m, 1H), 2.79 (m, 2H), 2.80 (s, 6H), 2.93 (m, 1H), 3.59 (m, 4H), 3.73 (m, 2H), 4.00 (m, 1H), 5.38 (m, 1H), 5.78 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.77 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 931 (2M + H)⁺, 466 (M + H)⁺, 276, 211 ;

25 TLC : R f 0.35 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

実施例 11-0093

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-(シクロヘキシルメチル) オキシム

NMR(CDCl₃) : δ 0.95 (m, 2H), 1.23 (m, 3H), 1.54 (m, 8H), 1.72 (m, 12H), 1.92
5 (m, 2H), 2.08 (m, 1H), 2.28 (m, 1H), 2.49 (m, 4H), 2.92 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.56
(m, 5H), 3.80(d, J = 6.40 Hz, 2H), 4.00 (m, 1H), 5.08 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz,
1H), 7.79 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 966 (2M + H)⁺, 483 (M + H)⁺, 242 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : R_f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

10

実施例 11-0094

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-シクロヘブチルオキシム

NMR(CDCl₃) : δ 1.54 (m, 18H), 1.75 (m, 5H), 1.85 (m, 2H), 1.94 (m, 3H), 2.07
15 (m, 1H), 2.28 (m, 1H), 2.50 (m, 4H), 2.92 (m, 1H), 3.22 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 3.74
(m, 1H), 3.99 (m, 1H), 4.16(m, 1H), 5.08 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.79 (d,
J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 966 (2M + H)⁺, 483 (M + H)⁺, 276, 194 ;

TLC : R_f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

20

実施例 11-0095

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-シクロヘキシルオキシム

NMR(CDCl₃) : δ 1.33 (m, 5H), 1.54 (m, 8H), 1.74 (m, 8H), 1.82 (m, 2H), 1.90 (m,
25 3H), 2.08 (m, 1H), 2.28 (m, 1H), 2.49 (m, 4H), 2.93 (m, 1H), 3.25 (m, 1H), 3.56 (m,
5H), 3.98 (m, 2H), 5.07 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 6.00 Hz,

1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 469 (M + H)⁺, 276, 194 ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

5 実施例 11-0096

4-アゼパン-1-イル-N-[1, 4-トランス-1-(4-フェノキシ
シクロヘキシル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃) : δ 0.85 (m, 1H), 1.42 (m, 4H), 1.54 (m, 4H), 1.75 (m, 8H), 1.92 (m,
2H), 2.18 (m, 1H), 2.28 (m, 1H), 2.43 (m, 2H), 2.58 (m, 1H), 2.96 (m, 1H), 3.58 (m,
10 4H), 4.00 (m, 1H), 4.12 (m, 1H), 5.34 (m, 1H), 5.78 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.88 (d, J =
7.50 Hz, 2H), 6.92 (t, J = 7.50 Hz, 1H), 7.26 (t, J = 7.50 Hz, 2H), 7.77 (d, J = 6.00 Hz,
1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 899 (2M + H)⁺, 450 (M + H)⁺, 276 ;

T L C : R f 0.23 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

15

実施例 11-0097

ベンジル 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミ
ノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシルカルバメート

NMR(CDCl₃) : δ 1.12 (m, 1H), 1.53 (m, 10H), 1.74 (m, 8H), 2.05 (m, 1H), 2.24
20 (m, 2H), 2.47 (m, 2H), 2.88 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 3.78 (m, 1H), 3.99 (m, 1H), 4.98
(m, 1H), 5.09 (s, 2H), 5.37 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.36 (m, 5H), 7.76 (d,
J = 6.20 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 507 (M + H)⁺, 415, 373, 276 ;

T L C : R f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

25

実施例 11-0098

ベンジル (4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) ア
ミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) メチルカルバメート

NMR(CDCl₃) : δ 0.96 (m, 1H), 1.53 (m, 11H), 1.74 (m, 8H), 2.09 (m, 1H), 2.26
(m, 2H), 2.46 (m, 2H), 2.84 (m, 1H), 3.09 (m, 2H), 3.56 (m, 4H), 3.99 (m, 1H), 4.81
5 (m, 1H), 5.10 (s, 2H), 5.21 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.35 (m, 5H), 7.78 (d,
J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 521 (M + H)⁺, 431, 387, 276 ;

TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

10 実施例 11-0099

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-メチルピペリ
ジン-3-カルボキサミド

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.41 (m, 6H), 1.68 (m, 6H), 1.87 (m, 1H), 2.00 (m, 1H), 2.14
(s, 3H), 2.61 (m, 1H), 2.74 (m, 1H), 2.97 (m, 1H), 3.48 (m, 2H), 3.70 (m, 2H), 6.31
15 (d, J = 6.2 Hz, 1H) 7.96 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 9.90 (s, 1H) ;

MS(FAB, Pos.) : 318 (M + H)⁺ ;

TLC : Rf 0.52 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0100

20 N-[1-(4-アミノシクロヘキシル) ピペリジン-3-イル]-4-ア
ゼパン-1-イルピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃) : δ 1.22 (m, 1H), 1.55 (m, 7H), 1.76 (m, 12H), 2.25 (m, 1H), 2.44
(m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.75 (m, 0.5H), 2.96 (m, 0.5H), 3.14 (m, 2H), 3.57 (m, 4H),
4.02 (m, 1H), 5.30 (m, 0.5H), 5.79 (m, 1.5H), 7.75 (m, 1H) ;

25 MS(ESI, Pos. 20 V) : 373 (M + H)⁺, 178 ;

TLC : Rf 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 20 : 2)。

実施例 11-0101

N-1-[4-(アミノメチル)シクロヘキシル]ピペリジン-3-イル-
4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-アミン

5 NMR(CDCl₃): δ 0.93 (m, 1H), 1.24 (m, 2H), 1.54 (m, 8H), 1.65 (m, 3H), 1.75 (m, 5H), 1.86 (m, 2H), 2.26 (m, 2H), 2.50 (m, 2H), 2.63 (m, 2H), 2.85 (m, 0.5H), 2.97 (m, 0.5H), 3.57 (m, 4H), 4.00 (m, 1H), 5.18 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.79 (m, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 387 (M + H)⁺, 276, 194 (M + 2H)²⁺, 185;

10 TLC: R_f 0.55 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:20:2)。

実施例 11-0102

4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
ピペリジン-1-イル-1-メチルシクロヘキサノール

15 NMR(CDCl₃): δ 1.22 (m, 3H), 1.42 (m, 3H), 1.54 (m, 5H), 1.64 (m, 4H), 1.75 (m, 8H), 2.28 (m, 2H), 2.47 (m, 1H), 2.57 (m, 1H), 2.95 (m, 1H), 3.58 (m, 4H), 3.77 (m, 1H), 4.00 (m, 1H), 5.16 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 7.79 (m, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 388 (M + H)⁺, 304, 276, 193;

TLC: R_f 0.45 (AcOEt: MeOH: TEA = 20:2:1)。

20

実施例 11-0103

N-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
ピペリジン-1-イルシクロヘキシル)メタンスルホンアミド

25 NMR(CDCl₃): δ 1.30 (m, 2H), 1.54 (m, 5H), 1.61 (m, 3H), 1.74 (m, 6H), 1.85 (m, 2H), 2.11 (m, 1H), 2.25 (m, 1H), 2.42 (m, 2H), 2.52 (m, 2H), 2.76 (m, 1H), 2.89 (m, 0.5H), 2.97 (s, 3H), 3.21 (m, 0.5H), 3.57 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 4.60 (m, 0.5H), 4.93

(m, 0.5H), 5.20 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 7.78 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 451 (M + H)⁺, 356, 276, 226 (M + 2H)²⁺, 178 ;

TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

5 実施例 11-0104

N-[(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) メチル] メタンスルホンアミド

NMR(CDCl₃) : δ 0.98 (m, 1H), 1.26 (m, 1H), 1.54 (m, 10H), 1.74 (m, 8H), 1.87
(m, 1H), 2.03 (m, 1H), 2.36 (m, 3H), 2.56 (m, 0.5H), 2.75 (m, 0.5H), 2.95 (m, 4H),
10 3.08 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 4.43 (m, 0.5H), 4.69 (m, 0.5H), 5.21 (m,
1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 465 (M + H)⁺, 276, 233 (M + 2H)²⁺, 138 ;

TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

15 実施例 11-0105

N-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) シクロヘキサンカルボキサミド

NMR(CDCl₃) : δ 1.11 (m, 1H), 1.25 (m, 2H), 1.54 (m, 10H), 1.75 (m, 15H), 2.04
(m, 2H), 2.23 (m, 1H), 2.41 (m, 3H), 2.87 (m, 1H), 3.56 (m, 5H), 4.00 (m, 2H), 5.13
20 (m, 1.5H), 5.61 (m, 0.5H), 5.77 (m, 1H), 7.79 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (FAB, Pos., matrix = Glycerin + m-NBA) : 483 (M + H)⁺, 193 ;

TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 10 : 1)。

実施例 11-0106

25 N-[(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) メチル] シクロヘキサンカルボキサ

ミド

NMR(CDCl₃) : δ 0.97 (m, 1H), 1.25 (m, 4H), 1.54 (m, 11H), 1.75 (m, 15H), 2.06 (m, 1H), 2.29 (m, 2H), 2.47 (m, 2H), 2.89 (m, 1H), 3.08 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.57 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.46 (m, 1H), 5.63 (m, 1H), 5.78 (m, 1H), 7.76 (m, 1H) ;

5 MS (FAB, Pos., matrix = Glycerin + m-NBA) : 497 (M + H)⁺, 193 ;

TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0107

N- (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
10 ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) アセトアミド

NMR(CDCl₃) : δ 1.13 (m, 1H), 1.55 (m, 11H), 1.74 (m, 8H), 1.96 (m, 3H), 2.33 (m, 3.5H), 2.55 (m, 0.5H), 2.72 (m, 0.5H), 2.92 (m, 0.5H), 3.58 (m, 4H), 4.01 (m, 2H), 5.15 (m, 0.5H), 5.32 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 5.94 (m, 0.5H), 7.78 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 415 (M + H)⁺, 276, 208 (M + 2H)²⁺, 140 ;

15 TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0108

N- [(4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
20 ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) メチル] アセトアミド

NMR(CDCl₃) : δ 0.97 (m, 1H), 1.25 (m, 1H), 1.54 (m, 9H), 1.74 (m, 6H), 1.86 (m, 4H), 1.99 (m, 3H), 2.24 (m, 1H), 2.43 (m, 3H), 2.74 (m, 0.5H), 2.94 (m, 0.5H), 3.17 (m, 2H), 3.56 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.20 (m, 1H), 5.49 (m, 0.5H), 5.76 (m, 1H), 5.81 (m, 0.5H), 7.78 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 429 (M + H)⁺, 276, 215 (M + 2H)²⁺, 154 ;

25 TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 1 1-0 1 0 9

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-メチルピペリ
ジン-2-カルボキサミド

NMR(CDCl₃): δ 1.68 (m, 12H), 2.08 (m, 3H), 2.29 (s, 3H), 2.64 (m, 1H), 2.97 (m,
5 1H), 3.63 (m, 4H), 6.14 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 8.09 (d, J = 6.2 Hz, 1H), 8.84 (s, 1H) ;

MS (FAB, Pos.) : 318 (M + H)⁺ ;

TLC : R_f 0.50 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 1 1-0 1 1 0

10 N' - (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) -N, N-ジメチルスルファミド

NMR(CDCl₃): δ 1.26 (m, 2H), 1.57 (m, 8H), 1.75 (m, 8H), 2.07 (m, 2H), 2.29 (m,
2H), 2.47 (m, 2H), 2.79 (m, 6H), 2.97 (m, 1H), 3.54 (m, 4.5H), 4.01 (m, 1.5H), 4.47
(m, 1H), 5.18 (m, 1H), 5.76 (m, 1H), 7.78 (m, 1H) ;

15 MS (FAB, pos. matrix = Glycerin + m-NBA) : 480 (M + H)⁺, 371, 287, 243, 217,
193, 122 ;

TLC : R_f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 1 1-0 1 1 1

20 N' - [(4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミ
ノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) メチル] -N, N-ジメチルス
ルファミド

NMR(CDCl₃): δ 0.97 (m, 1H), 1.26 (m, 1H), 1.54 (m, 10H), 1.74 (m, 4H), 1.87
(m, 3H), 2.26 (m, 2H), 2.45 (m, 2H), 2.57 (m, 1H), 2.81 (m, 6H), 2.88 (m, 1H), 3.00
25 (m, 1H), 3.57 (m, 5H), 4.01 (m, 1.5H), 4.13 (m, 0.5H), 4.31 (m, 0.5H), 4.81 (m, 0.5H),
5.16 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (FAB, Pos., matrix = Glycerin + m-NBA) : 494 (M + H)⁺, 301, 257, 217, 193, 122 ;

TL C : R f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

5 実施例 11-0112

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロヘ
ブチルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

NMR (CDCl₃) : δ 1.55 (m, 13H), 1.75 (m, 15H), 2.26 (m, 1H), 2.53 (m, 5H), 2.97
(m, 2H), 3.56 (m, 4H), 3.95 (m, 2H), 4.65 (m, 1H), 5.08 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.20
10 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 483 (M + H)⁺, 359 ;

TL C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0113

15 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (テトラヒ
ドロ-2H-ピラン-4-イルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3
-アミン

NMR (CDCl₃) : δ 1.55 (m, 9H), 1.74 (m, 6H), 1.84 (m, 5H), 2.27 (m, 1H), 2.52 (m,
4H), 2.73 (m, 1H), 2.96 (m, 2H), 3.44 (m, 2H), 3.57 (m, 4H), 3.99 (m, 4H), 4.65 (m,
20 1H), 5.18 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 471 (M + H)⁺, 359, 304 ;

TL C : R f 0.33 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0114

25 4- (3S) -3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミ
ノ] ピペリジン-1-イル-1-フェニルシクロヘキサノール

NMR(CDCl₃) : δ 1.54 (m, 7H), 1.80 (m, 13H), 2.43 (m, 4H), 2.64 (m, 1H), 3.03 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 4.01 (m, 1H), 5.13 (m, 1H), 5.75 (m, 1H), 7.24 (m, 1H), 7.34 (m, 2H), 7.51(m, 2H), 7.77 (m, 1H) ;

MS (FAB, pos. matrix = Glycerin + m-NBA) : 450 (M + H)⁺ ;

5 T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

実施例 1 1 - 0 1 1 5

N¹ - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - N² - メチルエタン - 1 , 2 - ジアミン

10 NMR(CDCl₃) : δ 1.54 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 2.71 (s, 3H), 3.24 (t, J = 5.20 Hz, 2H), 3.43 (m, 3H), 3.77 (m, 4H), 5.81 (d, J = 6.60 Hz, 1H), 7.54 (m, 1H), 7.65 (d, J = 6.60 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 250 (M + H)⁺, 125 ;

T L C : R f 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

15

実施例 1 1 - 0 1 1 6

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (1 , 4 - ジオキサスピロ [4 . 5] デカ - 8 - イル) ピペリジン - 3 - イル] ピリミジン - 2 - アミン

20 NMR(CDCl₃) : δ 1.53 (m, 8H), 1.72 (m, 12H), 2.30 (m, 2H), 2.55 (m, 2H), 2.95 (m, 1H), 3.58 (m, 4H), 3.92 (s, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.09 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.79 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 416 (M + H)⁺, 276, 208.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

25 実施例 1 1 - 0 1 1 7

N - (1 - ベンジルピペリジン - 3 - イル) - 4 - (1 , 4 - オキサゼパン

－４－イル) ピリミジン－２－アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.55 (m, 1H), 1.71 (m, 3H), 1.95 (m, 2H), 2.29 (m, 1H), 2.39 (m, 2H), 2.72 (m, 1H), 3.46 (d, J = 13.00 Hz, 1H), 3.52 (d, J = 13.00 Hz, 1H), 3.68 (m, 4H), 3.74 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.15 (m, 1H), 5.77 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.28 (m, 5H), 7.83 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 368 (M + H)⁺, 278 ;

TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0118

4- (1, 4-オキサゼパン-4-イル) -N-ピペリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.50 (m, 1H), 1.71 (m, 1H), 1.86 (m, 2H), 1.96 (m, 2H), 2.53 (m, 1H), 2.66 (m, 1H), 2.86 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.69 (m, 4H), 3.76 (m, 4H), 3.85 (m, 1H), 4.93 (m, 1H), 5.78 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 278 (M + H)⁺, 139.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.44 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 20 : 4)。

実施例 11-0119

エチル 4- (3S) -3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサンカルボキシラート

NMR(CDCl₃): δ 1.24 (m, 3H), 1.52 (m, 11H), 1.72 (m, 7H), 1.89 (m, 1H), 2.03 (m, 2H), 2.21 (m, 2H), 2.40 (m, 1H), 2.51 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 3.97 (m, 1H), 4.11 (m, 2H), 5.17 (m, 1H), 5.74 (m, 1H), 7.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 430 (M + H)⁺, 276, 215.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.52 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 1 1-0 1 2 0

4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イル-N-メトキシ-N-メチルシクロヘキサンカルボキサミド

5 NMR(CDCl₃): δ 1.51 (m, 9H), 1.71 (m, 6H), 1.90 (m, 4H), 2.24 (m, 1H), 2.37 (m, 2H), 2.54 (m, 2H), 2.79 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 3.13 (m, 3H), 3.56 (m, 4H), 3.65 (m, 3H), 3.98 (m, 1H), 5.10 (m, 1H), 5.73 (m, 1H), 7.75 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 445 (M + H)⁺, 384, 276, 223 (M + 2H)²⁺, 170 ;

TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

10

実施例 1 1-0 1 2 1

4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキサンカルボアルデヒド

15 NMR(CDCl₃): δ 1.29 (m, 4H), 1.54 (m, 6H), 1.74 (m, 6H), 2.01 (m, 4H), 2.28 (m, 3H), 2.53 (m, 2H), 2.95 (m, 1H), 3.56 (m, 4H), 3.98 (m, 1H), 5.16 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.78 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 9.61 (s, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺, 276, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.48 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

20 実施例 1 1-0 1 2 2

(4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イルシクロヘキシル) (シクロヘキシル) メタノール

25 NMR(CDCl₃): δ 1.23 (m, 6H), 1.54 (m, 12H), 1.75 (m, 12H), 2.04 (m, 2H), 2.25 (m, 2H), 2.40 (m, 2H), 2.56 (m, 2H), 2.97 (m, 1H), 3.55 (m, 4H), 4.02 (m, 1H), 5.39 (m, 1H), 5.76 (d, J = 6.20 Hz, 1H), 7.77 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 470 (M + H)⁺, 276, 235.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.48 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 11-0123

4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピロリジン-3-イル)ピリ
5 ミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆, 363.1K) : δ 1.48 (m, 4H), 1.68 (m, 6H), 2.13 (m, 1H), 2.38 (dd, J = 9.3, 5.2 Hz, 1H), 2.58 (m, 1H), 2.84 (dd, J = 9.3, 6.9 Hz, 1H), 3.53 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.59 (s, 2H), 4.27 (m, 1H), 5.83 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 5.94 (m, 1H), 7.24 (m, 5 H), 7.71 (d, J = 6.04 Hz, 1H) ;

10 M S (ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00 ;

T L C : R f 0.16 (CH₃Cl : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 11-0124

15 1-[2-(4-フェニルピペラジン-1-イル)ピリミジン-4-イル]
アゼパン

NMR(DMSO-d₆, 363.1K) : δ 1.52 (m, 4H), 1.72 (m, 4H), 3.20 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 3.60 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.83 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 5.93 (d, J = 6.04 Hz, 1H), 6.79 (t, J = 7.3 Hz, 1H), 6.97 (d, J = 7.7 Hz, 2H), 7.23 (m, 2H), 7.86 (d, J = 6.04 Hz, 1H) ;

20 M S (ESI, Pos. 20 V) : 338 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.40 ;

T L C : R f 0.18 (Hexane : AcOEt = 3 : 1)。

25 実施例 11-0125

1-[2-(4-メチルピペラジン-1-イル)ピリミジン-4-イル]ア

ゼパン

NMR(DMSO-d₆, 363.1K): δ 1.49 (m, 4H), 1.71 (m, 4H), 2.20 (s, 3H), 2.32 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 3.56 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.65 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 5.88 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

5 MS(ESI, Pos. 20 V): 276 (M + H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.76;

TLC: R_f 0.18 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0126

10 1-[2-(4-ベンジルピペラジン-1-イル)ピリミジン-4-イル]
アゼパン

NMR(DMSO-d₆, 363.1K): δ 1.48 (m, 4H), 1.68 (m, 4H), 2.40 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 3.50 (s, 2H), 3.54 (t, J = 5.70 Hz, 4H), 3.65 (t, J = 5.10 Hz, 4H), 5.87 (d, J = 6.0 Hz, 1H), 7.26 (m, 5H), 7.79 (d, J = 6.0 Hz, 1H);

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 352 (M + H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.96;

TLC: R_f 0.41 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 11-0127

20 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピロリジン
-1-イル酢酸

実施例 11-0128

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(シクロプロピルメチル)ピロリジン
25 -3-イル]ピリミジン-2-アミン

実施例 11-0129

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3-(メチルスルファニル) プロピル]
ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 実施例 11-0130

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピロリ
ジン-1-イル酪酸

実施例 11-0131

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2, 6-ジメチルヘプタ-5-エニ
ル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

実施例 11-0132

15 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(キノリン-2-イルメチル) ピロリ
ジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

実施例 11-0133

20 2-(アセチルアミノ)-1-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-
2-イル) アミノ] ピロリジン-1-イル-1, 2-ジデオキシ-D-ガラ
クトール

実施例 11-0134

25 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ネオペンチルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

実施例 11-0135

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-3-(2-フリル)プロパー
2-エニル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 368 (M+H)⁺;

HPLC 条件: B; HPLC 保持時間 (分): 3.97。

5

実施例 11-0136

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(オクチロキシ)ベンジル]ピロ
リジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10

実施例 11-0137

4-アゼパン-1-イル-N-(1-イソブチルピロリジン-3-イル)ピ
リミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 318 (M+H)⁺;

HPLC 条件: B; HPLC 保持時間 (分): 4.15。

15

実施例 11-0138

4-アゼパン-1-イル-N-(1-プロピルピロリジン-3-イル)ピリ
ミジン-2-アミン

20

実施例 11-0139

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-デカ-2-エニル]ピロリジ
ン-3-イルピリミジン-2-アミン

実施例 11-0140

25

4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(ベンジルオキシ)エチル]ピロ
リジン-3-イルピリミジン-2-アミン

実施例 11-0141

4-4-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イル酪酸

5

実施例 11-0142

2-(アセチルアミノ)-1-4-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリジン-1-イル-1, 2-ジデオキシ-D-ガラクトール

10

実施例 11-0143

4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピペリジン-4-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 731 (2M + H)⁺, 366 (M + H)⁺ ;

15 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 4.11。

実施例 11-0144

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-3-(2-フリル) プロパー-2-エニル] ピペリジン-4-イルピリミジン-2-アミン

20

実施例 11-0145

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルヘキシル) ピペリジン-4-イル] ピリミジン-2-アミン

25 実施例 11-0146

2-4-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ

ジン-1-イルエタノール

実施例 11-0147

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-デカ-2-エニル]ピペリジ
5 ン-4-イルピリミジン-2-アミン

実施例 11-0148

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-[(2E)-4-メチルペンター
2-エニル]シクロヘキサ-3-エン-1-イルメチル)ピペリジン-4-
10 イル]ピリミジン-2-アミン

実施例 11-0149

5-メチル-3-フェニル-N-2-[(4-ピロリジン-1-イルピリミジ
ン-2-イル)アミノ]エチルイソキサゾール-4-カルボキサミド
15 MS (ESI, Pos.20V) : 785 (2M + H)⁺, 393 (M + H)⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0150

N-2-[(4-ピペリジン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]エチ
20 ルベンズアミド
MS (ESI, Pos.20V) : 326 (M + H)⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0151

5-メチル-3-フェニル-N-2-[(4-ピペリジン-1-イルピリミジ
25 ン-2-イル)アミノ]エチルイソキサゾール-4-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 813 (2M + H)⁺, 407 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0152

- 5 N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
-2, 2-ジフェニルアセトアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 859 (2M + H)⁺, 430 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.49。

10 実施例 11-0153

N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
-5-メチル-3-フェニルイソキサゾール-4-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 841 (2M + H)⁺, 421 (M + H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

15

実施例 11-0154

N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
アクリルアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 290 (M + H)⁺ ;

- 20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0155

N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
シクロヘキサンカルボキサミド

- 25 MS (ESI, Pos.20V) : 346 (M + H)⁺, 267 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0156

N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] エチル
-3-シクロペンチルプロパンアミド

5 MS(ESI, Pos.20V) : 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0157

10 N-(2-[4-(3, 4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) ピ
リミジン-2-イル] アミノエチル) -2, 2-ジフェニルアセトアミド

MS(ESI, Pos.20V) : 927 (2M + H)⁺, 464 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.56。

実施例 11-0158

15 N-(2-[4-(3, 4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) ピ
リミジン-2-イル] アミノエチル) -5-メチル-3-フェニルイソキサ
ゾール-4-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

20

実施例 11-0159

N¹-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N²-メチル-N²
-(キノリン-2-イルメチル) エタン-1, 2-ジアミン

25 実施例 11-0160

ブチル N-2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]

エチル-N-メチルグリシナート

実施例 11-0161

5 N^1 -(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)- N^2 -[(2E)-
3,7-ジメチルオクタ-2,6-ジエニル]- N^2 -メチルエタン-1,2-
ジアミン

実施例 11-0162

10 プチル (2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
メチルピロリジン-1-イル) アセタート

実施例 11-0163

15 エチル N -2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
エチル-N-メチルグリシナート

実施例 11-0164

エチル (2-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
メチルピロリジン-1-イル) アセタート

20 実施例 11-0165

N -(4-ピロリジン-1-イルピリミジン-2-イル) エタン-1,2-
ジアミン

MS(ESI, Pos.20V): 208 (M+H);

HPLC 条件: B; HPLC 保持時間 (分): 2.86。

25

実施例 11-0166

1-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピロリジン-3-オール

実施例 11-0167

5 N-[4-(4-フェニルピペラジン-1-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V): 299 (M+H);

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.94。

10 実施例 11-0168

N-[4-(4-メチルピペラジン-1-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V): 237 (M+H);

HPLC 条件: B; HPLC 保持時間 (分): 2.59。

15

実施例 11-0169

N-(4-モルホリン-4-イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン

20 実施例 11-0170

N-(4-チオモルホリン-4-イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V): 240 (M+H);

HPLC 条件: B; HPLC 保持時間 (分): 2.89。

25

実施例 11-0171

2- (1-2- [(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペリジン-2-イル) エタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 266 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.73。

5

実施例 11-0172

(1-2- [(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペリジン-3-イル) メタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 252 (M+H) ;

10 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.74。

実施例 11-0173

1-2- [(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペリジン-4-オール

15 MS (ESI, Pos.20V) : 238 (M+H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.41。

実施例 11-0174

N- [4- (4-フェニル-3, 6-ジヒドロピリジン-1 (2H) -イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 296 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.08。

実施例 11-0175

25 2- (1-2- [(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペリジン-4-イル) エタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 266 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.63。

実施例 11-0176

- 5 1-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペリジン-3-オール

MS (ESI, Pos.20V) : 238 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.57。

10 実施例 11-0177

N-[4-(3, 6-ジヒドロピリジン-1(2H)-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 220 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.70。

15

実施例 11-0178

4-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペラジン-1-カルボアルデヒド

20 実施例 11-0179

2-(4-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペラジン-1-イル) エタノール

実施例 11-0180

- 25 N-[4-(3, 5-ジメチルピペリジン-1-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 250 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0181

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 236 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.84。

10 実施例 11-0182

N- [4- (4-メチル-1, 4-ジアゼパン-1-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 251 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.68。

15

実施例 11-0183

N- [4- (2, 6-ジメチルモルホリン-4-イル) ピリミジン-2-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 252 (M +H) ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.68。

実施例 11-0184

N-4- [(2S)-2- (メトキシメチル) ピロリジン-1-イル] ピリミジン-2-イルエタン-1, 2-ジアミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 252 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.71。

実施例 1 1-0 1 8 5

エチル 1-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペ
リジン-3-カルボキシラート

5 MS (ESI, Pos.20V) : 294 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

実施例 1 1-0 1 8 6

10 エチル 1-2-[(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピペ
リジン-4-カルボキシラート

MS (ESI, Pos.20V) : 294 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

実施例 1 1-0 1 8 7

15 N- [4- (4-フェニルピペリジン-1-イル) ピリミジン-2-イル]
エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 298 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.08。

20 実施例 1 1-0 1 8 8

N- [4- (4-ベンジルピペリジン-1-イル) ピリミジン-2-イル]
エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 312 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25

実施例 1 1-0 1 8 9

N- [4- (1, 4'-ビピペリジン-1'-イル) ピリミジン-2-イル]
エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 305 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

5

実施例 11-0190

N-4- [4- (4-メトキシフェニル) ピペラジン-1-イル] ピリミジ
ン-2-イルエタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 329 (M +H) ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.81。

実施例 11-0191

N- (4-4- [4- (トリフルオロメチル) フェニル] ピペラジン-1-
イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 367 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0192

20 N- [4- (4-シクロヘキシルピペラジン-1-イル) ピリミジン-2-
イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 305 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0193

25 N- [4- (4-ベンジルピペラジン-1-イル) ピリミジン-2-イル]
エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 313 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0194

- 5 N-4-[4-(2,4-ジメチルフェニル)ピペラジーン-1-イル]ピリミジン-2-イルエタン-1,2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 327 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

- 10 実施例 11-0195

N-(4-4-[(2E)-3-フェニルプロパー-2-エニル]ピペラジーン-1-イルピリミジン-2-イル)エタン-1,2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 339 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.86。

15

実施例 11-0196

N-4-[4-(2-オキソ-2-ピロリジン-1-イルエチル)ピペラジン-1-イル]ピリミジン-2-イルエタン-1,2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 334 (M +H) ;

- 20 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.77。

実施例 11-0197

エチル 4-2-[(2-アミノエチル)アミノ]ピリミジン-4-イルピペラジン-1-カルボキシラート

- 25 MS (ESI, Pos.20V) : 295 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.78。

実施例 11-0198

N- (4-4- [5- (トリフルオロメチル) ピリジン-2-イル] -1,
4-ジアゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミ
5 ン

MS (ESI, Pos.20V) : 382 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0199

10 N- (1-2- [(2-アミノエチル) アミノ] ピリミジン-4-イルピロリ
 ジン-3-イル) -N-メチルアセトアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 279 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.57。

15 実施例 11-0200

N- [4- (2-ピリジン-2-イルアゼパン-1-イル) ピリミジン-2
-イル] エタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 313 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.74。

20

実施例 11-0201

(3R) -N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-ベ
ンジルアゼパン-3-アミン

NMR (DMSO-d₆) : 1.36 (m, 5H), 1.59 (m, 8H), 1.82 (m, 1H), 2.56 (m, 3H), 2.80 (m,
25 1H), 3.48 (m, 4H), 3.63 (s, 2H), 3.95 (m, 1H), 5.80 (d, J = 5.90 Hz, 1H), 6.08 (m,
1H), 7.24 (m, 5H), 7.68 (d, J = 5.90 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 380 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ;

TLC : Rf 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

5 実施例 11-0202

(3R)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アゼパン-3-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 5H), 1.61 (m, 9H), 2.60 (dd, J = 13.50, 7.10 Hz, 1H), 2.72 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 2.89 (dd, J = 13.50, 4.30 Hz, 1H), 3.56 (m, 4H), 3.87 (m, 1H), 5.81 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 6.09 (m, 1H), 7.70 (d, J = 6.00 Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 290 (M + H)⁺, 145.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92 ;

TLC : Rf 0.20 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15 実施例 11-0203

(3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-アミン

実施例 11-0204

20 (3R)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-アミン

実施例 11-0205

25 (3R)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(2-エチルブチル)アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 374 (M + H)⁺, 290, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0206

(3R)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-イ
5 ソブチルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 346 (M + H)⁺, 290, 173.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0207

10 (3R)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-シ
クロヘキシルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 346, 290, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

15 実施例 11-0208

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-ベンジルピペリジン-3-イ
ル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20V) : 366 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

20

実施例 11-0209

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20V) : 367 (M + H)⁺, 184 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 11-0210

4-アゼバン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 276, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0211

4-アゼバン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 332 (M + H)⁺, 276, 166.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0212

4-アゼバン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 276, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0213

4-アゼバン-1-イル-N-[1-(3,3-ジメチルシクロヘキシル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M + H)⁺, 262, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

25

実施例 11-0214

4-アゼバン-1-イル-N-[1-(2-メトキシ-1-メチルエチル)

ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 334 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

5 実施例 11-0215

4-アゼパン-1-イル-N- (1-シクロブチルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 316 (M + H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

10

実施例 11-0216

4-アゼパン-1-イル-N- (1-テトラヒドロ-2H-チオピラン-4-
-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺, 262, 193 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0217

4-アゼパン-1-イル-N- (1-シクロペンチルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 330 (M + H)⁺, 262, 193, 165.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0218

25

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-メチルブチル) ピロリジン-3-
-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 332 (M + H)⁺, 262, 166.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0 2 1 9

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1,2-ジメチルプロピル)ピロリ
5 ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 332 (M+H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0 2 2 0

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2,2-ジメトキシ-1-メチルエ
チル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 364 (M+H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

15 実施例 1 1-0 2 2 1

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1,3-ジメチルブチル)ピロリジ
ン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 346 (M+H)⁺, 262, 173.5 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 1 1-0 2 2 2

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチルペンチル)ピロリジン-
3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 346 (M+H)⁺, 262, 173.5 (M+2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0 2 2 3

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3,3-ジメトキシ-1-メチルプロピル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 378 (M + H)⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0 2 2 4

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチルペンタ-4-エニル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 344 (M + H)⁺, 262, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 2 2 5

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘキサ-2-エン-1-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 342 (M + H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0 2 2 6

20 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-メチルシクロペンチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 344 (M + H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

25 実施例 1 1-0 2 2 7

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-メチルシクロペンチル)ピロリ

ジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 344 (M + H)⁺, 262, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

5 実施例 11-0228

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-エチルブチル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 346 (M + H)⁺, 262, 173.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

10

実施例 11-0229

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (2-メチルシクロペンタ-2-エン-1-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 342 (M + H)⁺, 193 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0230

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-メチルピペリジン-4-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 359 (M + H)⁺, 262, 180 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

実施例 11-0231

25 4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-メチルヘキシル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 262, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 2 3 2

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-エチルペンチル)ピロリジン-
5 3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 262, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0 2 3 3

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-メチルシクロヘキシル)ピロリ
ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 262, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

15 実施例 1 1-0 2 3 4

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-メチルシクロヘキシル)ピロリ
ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 262, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

20

実施例 1 1-0 2 3 5

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-メチルシクロヘキシル)ピロリ
ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 262, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0236

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3,4-ジメチルシクロペンチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 262, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0237

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-メトキシシクロヘキシル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0238

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-プロピルブチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 262, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0239

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘプチルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 262, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

25

実施例 11-0240

4-アゼパン-1-イル-N-(1-トリシクロ[2.2.1.0^{2,6}]ヘプ

ター 3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 354 (M + H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

5 実施例 11-0241

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-イソプロピルピペリジン-4-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 262, 194 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

10

実施例 11-0242

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-メチルヘプチル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 262, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0243

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-シクロヘキシルエチル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M + H)⁺, 262, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0244

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-プロピルピペリジン-4-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 262, 194 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

実施例 1 1-0 2 4 5

4-アゼバン-1-イル-N-[1-(1,4-ジオキサスピロ[4.5]
5 デカ-8-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 402 (M+H)⁺, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0 2 4 6

10 4-アゼバン-1-イル-N-(1-シクロオクチルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M+H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

15 実施例 1 1-0 2 4 7

4-アゼバン-1-イル-N-[1-(3,5-ジメチルシクロヘキシル)
ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M+H)⁺, 262, 186.5 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

20

実施例 1 1-0 2 4 8

4-アゼバン-1-イル-N-1-[3-(ジエチルアミノ)-1-メチル
プロピル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 389 (M+H)⁺, 262, 195 (M+2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

実施例 1 1-0 2 4 9

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-エチルヘキシル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 262 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 1 1-0 2 5 0

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 378 (M + H)⁺, 262, 189.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 2 5 1

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(トリフルオロメチル)シクロヘキシル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 412 (M + H)⁺, 262, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0 2 5 2

20 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-プロピルシクロヘキシル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 262, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

25 実施例 1 1-0 2 5 3

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-シクロヘキシルプロピル)ピロ

リジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

5 実施例 1 1-0 2 5 4

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ブチルペンチル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

10

実施例 1 1-0 2 5 5

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチル-3-フェニルプロピル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 394 (M + H)⁺, 262, 197.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 2 5 6

4-アゼパン-1-イル-N-(1-デカヒドロナフタレン-2-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 398 (M + H)⁺, 262, 199.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 1 1-0 2 5 7

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロデシルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 400 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 1 1-0 2 5 8

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフ
5 タレン-2-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 392 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0 2 5 9

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ペンチルヘキシル) ピロリジン
-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 416 (M + H)⁺, 262, 208.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.51。

15 実施例 1 1-0 2 6 0

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(6-メトキシ-1, 2, 3, 4-テ
トラヒドロナフタレン-2-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2
-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 422 (M + H)⁺, 262 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 1-0 2 6 1

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(7-メトキシ-1, 2, 3, 4-テ
トラヒドロナフタレン-2-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2
25 -アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 422 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 1-0262

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ベンジルピペリジン-4-イル)
5 ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 435 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 1 1-0263

10 4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロデシルピロリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 428 (M + H)⁺, 262, 214.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.45。

15 実施例 1 1-0264

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-フェニルシクロヘキシル) ピロ
リジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 420 (M + H)⁺, 262, 210.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

20

実施例 1 1-0265

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-フェニルシクロヘキシル) ピロ
リジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 420 (M + H)⁺, 262, 210.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0266

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-フェニルエチル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 449 (M + H)⁺, 262, 225 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0267

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチル-2, 2-ジフェニルエチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 456 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0268

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ベンジル-2-フェニルエチル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 456 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

実施例 11-0269

20 4-アゼパン-1-イル-N-(1-テトラヒドロチエン-3-イルピペリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺, 276, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

25 実施例 11-0270

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3, 3-ジメチルシクロヘキシル)

ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 276, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

5 実施例 11-0271

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロブチルピペリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 330 (M + H)⁺, 276, 193, 165.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

10

実施例 11-0272

4-アゼパン-1-イル-N-(1-テトラヒドロ-2H-チオピラン-4-
-イルピペリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 376 (M + H)⁺, 276, 188.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0273

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロペンチルピペリジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 344 (M + H)⁺, 276, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0274

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチルブチル) ピペリジン-3-
25 -イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 346 (M + H)⁺, 276, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0275

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-メチルシクロペンチル)ピペリ
5 ジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 276, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0276

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-エチルブチル)ピペリジン-3-
-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 318 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

15 実施例 11-0277

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-メチル-1,
4'-ビペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 373 (M + H)⁺, 276, 187 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

20

実施例 11-0278

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘプター-2-エン-1-イルピ
ペリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 370 (M + H)⁺, 276 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0279

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチルヘキシル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 276, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0280

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-メチルシクロヘキシル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M + H)⁺, 276, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0281

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3, 4-ジメチルシクロペンチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0282

20 4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘプチルピペリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 372 (M + H)⁺, 276, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

25 実施例 11-0283

4-アゼパン-1-イル-N-(1-トリシクロ [2.2.1.0^{2,6}]ヘプ

ター 3-イルピペリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 368 (M + H)⁺, 276, 184.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

5 実施例 11-0284

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-イソプロピル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 276, 201 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

10

実施例 11-0285

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチルヘプチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 276, 194.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0286

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-プロピル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 276, 201 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

実施例 11-0287

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1,4-ジオキサスピロ[4.5]デカ-8-イル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 416 (M + H)⁺, 276, 208.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0288

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロオクチルピペリジン-3-イル)
5 ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 276, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0289

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3, 5-ジメチルシクロヘキシル)
ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 276, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

15 実施例 11-0290

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3-(ジエチルアミノ)-1-メチル
プロピル] ピペリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 403 (M + H)⁺, 276, 202 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

20

実施例 11-0291

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-エチルヘキシル) ピペリジン-
3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 276, 194.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0292

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2,3-ジヒドロ-1H-インデン-2-イル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 392 (M + H)⁺, 276, 196.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0293

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(トリフルオロメチル)シクロヘキシル]ピペリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 426 (M + H)⁺, 276, 213.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0294

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-メチル-3-フェニルプロピル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 408 (M + H)⁺, 276, 204.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0295

20 4-アゼパン-1-イル-N-(1-デカヒドロナフタレン-2-イルピペリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 412 (M + H)⁺, 276, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

25 実施例 11-0296

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1,2,3,4-テトラヒドロナフ

タレン-2-イル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 406 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

5 実施例 11-0297

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-ペンチルヘキシル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 430 (M + H)⁺, 276, 215.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.49。

10

実施例 11-0298

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (7-メトキシ-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 436 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0299

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-ベンジルー
20 1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 449 (M + H)⁺, 276, 225 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0300

25

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (4-フェニルシクロヘキシル) ピペリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 434 (M + H)⁺, 276, 217.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0301

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-フェニルエチル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 276, 232 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

10 実施例 11-0302

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-エチル-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 276, 194 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

15

実施例 11-0303

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-ベンジル-3'-メチル-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 232 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0304

4-アゼパン-1-イル-N- (1-シクロペンタ-3-エン-1-イルピペリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 342 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0305

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-プロピルヘブチル)ピペリジン
-3-イル]ピリミジン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 416 (M + H)⁺, 276, 208.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0306

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(ベンジルオキシ)-1-メチル
エチル]ピペリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 424 (M + H)⁺, 334 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0307

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-イソブチル
-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 415 (M + H)⁺, 276, 208 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

20 実施例 11-0308

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-テトラヒドロ
チエン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 376 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

25

実施例 11-0309

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (3, 3-ジ
メチルシクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 400 (M + H)⁺, 332, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5

実施例 1 1-0 3 1 0

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (2-メトキ
シ-1-メチルエチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0 3 1 1

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-シクロブチル
アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 344 (M + H)⁺, 290, 172.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0 3 1 2

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-テトラヒドロ
20 -2 H-チオピラン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 390 (M + H)⁺, 290, 195.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0 3 1 3

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-シクロペンチ
ルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 358 (M + H)⁺, 290, 179.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 1 1-0 3 1 4

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-メチル
ブチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺, 290, 180.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

10 実施例 1 1-0 3 1 5

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (2, 2-ジ
メトキシ-1-メチルエチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 392 (M + H)⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

15

実施例 1 1-0 3 1 6

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1, 3-ジ
メチルブチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0 3 1 7

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-メチル
ペンチル) アゼパン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0318

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(3,3-ジ
メトキシ-1-メチルプロピル)アゼパン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 406 (M + H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.01。

実施例 11-0319

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-メチル
ペンタ-4-エニル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 372 (M + H)⁺, 186.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0320

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(2-メチル
シクロペンチル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 372 (M + H)⁺, 290, 186.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

20 実施例 11-0321

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(3-メチル
シクロペンチル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 372 (M + H)⁺, 290, 186.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

25

実施例 11-0322

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-メチル
ピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 290, 194 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

5

実施例 1 1-0 3 2 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-シクロヘプタ
-2-エン-1-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 384 (M + H)⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 3 2 4

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-メチル
ヘキシル) アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 290, 194.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 1 1-0 3 2 5

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-エチル
ペンチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 290, 194.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 1-0 3 2 6

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (2-メチル
シクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0327

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (3-メチルシクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 290, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10 実施例 11-0328

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (4-メチルシクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 290, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

15

実施例 11-0329

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (3, 4-ジメチルシクロペンチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 290, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0330

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (2-メトキシシクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 402 (M + H)⁺, 290, 201.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0331

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-プロピ
ルブチル)アゼパン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 1 1-0332

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-シクロヘプ
ルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 386 (M + H)⁺, 290, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0333

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-トリシクロ[2.
2. 1. 0^{2, 6}]ヘプタ-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 382 (M + H)⁺, 290, 191.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

20 実施例 1 1-0334

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[(1R, 5S)
-8-メチル-8-アザビシクロ[3. 2. 1]オクタ-3-イル]アゼパ
ン-3-アミン

25 実施例 1 1-0335

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-イソブ

ロピルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 290, 208 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

5 実施例 11-0336

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-(1-メチル
ヘブチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 402 (M + H)⁺, 290, 201.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

10

実施例 11-0337

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-(1-シクロ
ヘキシルエチル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 400 (M + H)⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0338

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-(1-プロピ
ルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 290, 208 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 11-0339

25 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-(1, 4-ジ
オキサスピロ [4. 5] デカ-8-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 430 (M + H)⁺, 215.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0340

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-シクロオクチ
ルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 400 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 1-0341

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [3- (ジエ
チルアミノ) -1-メチルプロピル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 417 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

15 実施例 1 1-0342

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-エチル
ヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 402 (M + H)⁺, 290, 201.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

20

実施例 1 1-0343

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (2, 3-ジ
ヒドロ-1H-インデン-2-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 406 (M + H)⁺, 203.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0344

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[4-(トリフルオロメチル)シクロヘキシル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 440 (M+H)⁺, 220.5 (M+2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.18。

実施例 1 1-0345

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(2-プロピルシクロヘキシル)アゼパン-3-アミン

10 MS(ESI, Pos.20V): 414 (M+H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.23。

実施例 1 1-0346

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-メチル-3-フェニルプロピル)アゼパン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 422 (M+H)⁺, 290, 211.5 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.20。

実施例 1 1-0347

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-デカヒドロナフタレン-2-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 426 (M+H)⁺, 213.5 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.29。

25 実施例 1 1-0348

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1, 2, 3,

4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 420 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5 実施例 11-0349

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(6-メトキシ-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 450 (M + H)⁺, 290 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0350

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(7-メトキシ-1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン-2-イル) アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 450 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0351

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-ベンジ
ルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 290, 232 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

25 実施例 11-0352

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-シクロドデシ

ルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 456 (M + H)⁺, 290, 228.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.47。

5 実施例 1 1-0 3 5 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (4-フェニ
ルシクロヘキシル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 448 (M + H)⁺, 224.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

10

実施例 1 1-0 3 5 4

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
フェニルエチル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 290 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 1-0 3 5 5

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-エチル
ピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 290, 201 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 1 1-0 3 5 6

25

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ベンジ
ル-3-メチルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 239 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0357

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [2- (ベン
ジロキシ) -1-メチルエチル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 438 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 1-0358

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-イソブ
チルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 290, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

15 実施例 1 1-0359

1- (2-アダマンチル) -N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-
イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 424 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

20

実施例 1 1-0360

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-イソブチリルピペリジン-3-
イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 345, 208 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0 3 6 1

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ブチリルピペリジン-3-イル)
ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 345, 262, 208 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0 3 6 2

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メチルベンゾイル)ピペリ
ジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 345, 232 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0 3 6 3

N-[1-(1-アセチルピペリジン-3-イル)ピロリジン-3-イル]
15 -4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 345, 194 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 1 1-0 3 6 4

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-フルオロベンゾイル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 345, 234 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

25 実施例 1 1-0 3 6 5

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-メチルベンゾイル)ピペリ

ジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 345, 232 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

5 実施例 11-0366

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ヘプタノイルピペリジン-3-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 345, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

10

実施例 11-0367

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メトキシベンゾイル) ピペリジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 345, 240 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0368

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルベンゾイル) ピペリジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20 MS(ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0369

25 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ヘキサノイルピペリジン-3-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345, 222 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 1-0370

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェニルアセチル)ピペリジン
5 -3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 232 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0371

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-メトキシベンゾイル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 345, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.06。

15 実施例 1 1-0372

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(2E)-3-フェニルプロパー
2-エノイル]ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-
2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 949 (2M + H)⁺, 475 (M + H)⁺, 131 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 1-0373

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-プロピオニルピペリジン-3-
イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 262, 201 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2, 94。

実施例 11-0374

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロプロピルカルボニル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 413 (M + H)⁺, 345, 207 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0375

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-クロロベンゾイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 345, 242 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0376

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロヘキシルカルボニル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 345, 228 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

20 実施例 11-0377

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フロイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 439 (M + H)⁺, 262, 220 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

25

実施例 11-0378

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ペンタノイルピペリジン-3-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 345, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

5

実施例 11-0379

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェノキシアセチル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 240 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0380

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-オクタノイルピペリジン-3-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345, 236 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 11-0381

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-フェニルプロパノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 345, 239 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0382

25 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[2-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-

アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 517 (M + H)⁺, 259 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

5 実施例 11-0383

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-ナフトイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 155 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10

実施例 11-0384

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(チエン-2-イルアセチル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 235 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0385

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3,3-ジメチルブタノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345, 222 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0386

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メトキシベンゾイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 345, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 3 8 7

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-エチルヘキサノイル)ピペ
5 リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345, 236 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 1 1-0 3 8 8

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-フルオロベンゾイル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 345, 234 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

15 実施例 1 1-0 3 8 9

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-クロロベンゾイル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 345, 242 (M + 2H)²⁺, 139 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

20

実施例 1 1-0 3 9 0

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-tert-ブチルベンゾイ
ル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 345, 161 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0391

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(チエン-2-イルカルボニル)
ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン
MS(ESI, Pos.20V): 455 (M+H)⁺, 345, 228 (M+2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0392

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-クロロフェニル)アセチル]
ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン
MS(ESI, Pos.20V): 499, 497 (M+H)⁺, 249 (M+2H)²⁺;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.22。

実施例 11-0393

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メチルブタノイル)ピペリ
ジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン
MS(ESI, Pos.20V): 429 (M+H)⁺, 345, 215 (M+2H)²⁺;

15 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

実施例 11-0394

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[4-(トリフルオロメチル)ベン
ゾイル]ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-
アミン

MS(ESI, Pos.20V): 517 (M+H)⁺, 259 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.23。

25

実施例 11-0395

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ベンゾイルピペリジン-3-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 449 (M + H)⁺, 345, 225 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

5

実施例 11-0396

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フルオロベンゾイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 467 (M + H)⁺, 345, 234 (M + 2H)²⁺, 123 ;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

実施例 11-0397

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ジフェニルアセチル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 539 (M + H)⁺, 345, 270 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.31。

実施例 11-0398

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フェノキシプロパノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20 MS(ESI, Pos.20V): 493 (M + H)⁺, 247(M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.16。

実施例 11-0399

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルペンタノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345, 222 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0400

- 5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メトキシアセチル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 417 (M + H)⁺, 345, 262, 209 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

10 実施例 11-0401

エチル 4-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル)-4-オキソプタノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 237 (M + 2H)²⁺, 214 ;

- 15 HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0402 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-シクロペンチルプロパノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イル
20 ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 345, 235 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

- 25 実施例 11-0403 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-プロピルペンタノイル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミ

ジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345, 236 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

5

実施例 11-0404 メチル

5-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]
ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル)-5-オキソペンタノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 237 (M + 2H)²⁺, 221, 193 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0405

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-クロロフェノキシ) アセチ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 515, 513 (M + H)⁺, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0407

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロペンチルアセチル) ピペ
20 リジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 345, 228 (M + 2H)²⁺, 173 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0408

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロペンチルカルボニル) ピ
ペリジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 441 (M + H)⁺, 345, 221 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 4 0 9

5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メシチルカルボニル) ピペリジ
ン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 345, 147 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

10 実施例 1 1-0 4 1 0

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(3-メトキシフェニル) アセチ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 247 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

15

実施例 1 1-0 4 1 1

エチル 3-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) -3-オキソプロパ
ノアート

20 MS (ESI, Pos.20V) : 459 (M + H)⁺, 262, 230 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 1 1-0 4 1 2

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-ブトキシベンゾイル) ピペ
25 リジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 345, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 1 1-0 4 1 3

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(ベンジルオキシ) アセチル] ピ
5 ペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 403 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0 4 1 4

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルブタノイル) ピペリ
ジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 345, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

15 実施例 1 1-0 4 1 5

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メトキシフェニル) アセチ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 345, 247 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 1 1-0 4 1 6

エチル 5-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) -5-オキソペンタ
ノアート

25 MS (ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 393, 244 (M + 2H)²⁺, 221 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0417

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロブチルカルボニル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 427 (M + H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0418

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-エチルブタノイル)ピペ
10 リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345, 222 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0419

15 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[4-(トリフルオロメトキシ)
ベンゾイル]ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2
-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 533 (M + H)⁺, 345, 267 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

20

実施例 11-0420

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メチルスルホニル)ピペリジン
-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 423 (M + H)⁺, 345, 262 (M + 2H)²⁺, 212 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 1 1-0 4 2 1

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ペンチルスルホニル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 262, 240 (M + 2H)²⁺, 212 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 4 2 2

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(プロピルスルホニル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 451 (M + H)⁺, 262, 226 (M + 2H)²⁺, 190 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 1-0 4 2 3

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(イソプロピルスルホニル)ピペリジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 451 (M + H)⁺, 345, 262, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0 4 2 4

20 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 345 (M + H)⁺, 262 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.80。

25 実施例 1 1-0 4 2 5

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ブチルスルホニル)ピペリジン

－3－イル] ピロリジン－3－イルピリミジン－2－アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 465 (M + H)⁺, 262, 233(M + 2H)²⁺, 204 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

5 実施例 11-0426

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェニルスルホニル) ピペリジン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 262, 243 (M + 2H)²⁺, 224 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10

実施例 11-0427

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-[4-(トリフルオロメチル) フェニル] スルホニルピペリジン-3-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 553 (M + H)⁺, 277(M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0428

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メトキシフェニル) スルホニル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 515 (M + H)⁺, 345, 258 (M + 2H)²⁺, 171 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25 実施例 11-0429

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ベンジルスルホニル) ピペリジ

ン-3-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 345, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

5 実施例 11-0430

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メチルフェニル) スルホニ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 262, 250 (M + 2H)²⁺, 238 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

10

実施例 11-0431

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(3-メチルフェニル) スルホニ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 262, 250 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0432

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(2-メチルフェニル) スルホニ
ル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 262, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0433

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-[4-(トリフルオロメトキシ)
25 フェニル] スルホニルピペリジン-3-イル) ピロリジン-3-イル] ピリ
ミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 569 (M + H)⁺, 308, 285 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 1 1-0 4 3 4

5 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-ブトキシフェニル) スルホニル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 557 (M + H)⁺, 345, 279 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.44。

10

実施例 1 1-0 4 3 5

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-tert-ブチルフェニル) スルホニル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 541 (M + H)⁺, 271 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.40。

実施例 1 1-0 4 3 6

20

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-ニトロフェニル) スルホニル] ピペリジン-3-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 530 (M + H)⁺, 265 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 4 3 7

25

4-[(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) スルホニル] ベンゾニトリル

MS (ESI, Pos.20V) : 510 (M + H)⁺, 255(M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 1-0438

5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-ナフチルスルホニル)ピペ
リジン-3-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 535 (M + H)⁺, 268 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

10 実施例 1 1-0439

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-イソブチリルピペリジン-4-
イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

15

実施例 1 1-0440

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ブチリルピペリジン-4-イル)
ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 193 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0441

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メチルベンゾイル)ピペ
リジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 345, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0 4 4 2

N- [1- (1-アセチルピペリジン-4-イル) ピロリジン-3-イル]
-4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 387 (M + H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 1 1-0 4 4 3

4-アゼパン-1-イル-N-1- [1- (4-フルオロベンゾイル) ピペ
10 リジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 345, 193, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 4 4 4

4-アゼパン-1-イル-N-1- [1- (4-メチルベンゾイル) ピペ
15 リジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 345, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

20 実施例 1 1-0 4 4 5

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (1-ヘプタノイルピペリジン-4-
イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 345, 229 (M + 2H)²⁺, 173 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.2。

25

実施例 1 1-0 4 4 6

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メトキシベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 479 (M+H)⁺, 345, 193, 135 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

5

実施例 11-0447

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 463 (M+H)⁺, 345, 119 ;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

実施例 11-0448

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ヘキサノイルピペリジン-4-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 443 (M+H)⁺, 345, 173 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0449

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェニルアセチル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20

MS(ESI, Pos.20V): 463 (M+H)⁺, 232 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

実施例 11-0450

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-メトキシベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 345, 193, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0451

5 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(2E)-3-フェニルプロパー
2-エノイル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-
2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 949 (2M + H)⁺, 475 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10

実施例 11-0452

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-プロピオニルピペリジン-4-
イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 345, 173 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 11-0453

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロプロピルカルボニル)ピ
ペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 413 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0454

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-クロロベンゾイル)ピペリ
ジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485, 483 (M + H)⁺, 345, 139 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 4 5 5

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロヘキシルカルボニル)ピ
5 ペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 4 5 6

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フロイル)ピペリジン-4-
イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 439 (M + H)⁺, 220 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

15 実施例 1 1-0 4 5 7

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ペンタノイルピペリジン-4-
イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

20

実施例 1 1-0 4 5 8

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェノキシアセチル)ピペリジ
ン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 429, 240 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0 4 5 9

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-オクタノイルピペリジン-4-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345, 236 (M + 2H)²⁺, 173 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.28。

実施例 1 1-0 4 6 0

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-フェニルプロパノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 345, 239 (M + 2H)²⁺, 173 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0 4 6 1

15 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[2-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 517 (M + H)⁺, 259 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

20 実施例 1 1-0 4 6 2

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-ナフトイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 155 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

25

実施例 1 1-0 4 6 3

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(チエン-2-イルアセチル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 235 (M + 2H)²⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 1 1-0 4 6 4

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3,3-ジメチルブタノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345, 173 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 4 6 5

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メトキシベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 345, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0 4 6 6

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-エチルヘキサノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 4 6 7

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-フルオロベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 345, 234 (M + 2H)²⁺, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0468

5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-クロロベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 345, 138 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

10 実施例 11-0469

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-tert-ブチルベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 345, 161 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

15

実施例 11-0470

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(チエン-2-イルカルボニル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 345, 193 ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0471

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-クロロフェニル)アセチル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 499, 497 (M + H)⁺, 249 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0 4 7 2

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-メチルブタノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 429 (M+H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0 4 7 3

10 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[4-(トリフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 517 (M+H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

15 実施例 1 1-0 4 7 4

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ベンゾイルピペリジン-4-イル)ピロリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 449 (M+H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

20

実施例 1 1-0 4 7 5

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フルオロベンゾイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 467 (M+H)⁺, 345, 234 (M+2H)²⁺, 193 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0476

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ジフェニルアセチル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 539 (M + H)⁺, 345, 167 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0477

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-フェノキシプロパノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS(ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 345, 247 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0478

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルペンタノイル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0479

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メトキシアセチル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 417 (M + H)⁺, 345, 262 (M + 2H)²⁺, 209 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.86。

25 実施例 11-0480

エチル 4-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)

アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) -4-オキソプタノ
アート

MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 214 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

5

実施例 11-0481

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(3-シクロペンチルプロパノイ
ル) ピペリジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 345, 235 (M + 2H)²⁺, 173 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0482

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-プロピルペンタノイル) ピ
ペリジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0483

メチル 5-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
20 アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) -5-オキソペンタ
ノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 221 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

25 実施例 11-0484

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-クロロフェノキシ) アセチ

ル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5 実施例 11-0486 .

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロペンチルアセチル) ピペ
リジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 345, 173 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

10

実施例 11-0487

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロペンチルカルボニル) ピ
ペリジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 441 (M + H)⁺, 345, 193 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0488

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メシチルカルボニル) ピペリジ
ン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 345, 147 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0489

25

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(3-メトキシフェニル) アセチ
ル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 247 (M + 2H)²⁺, 173 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0490

5 エチル 3-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ]ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル)-3-オキソプロパ
ノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 459 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

10 実施例 1 1-0491

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(4-ブトキシベンゾイル)ピペ
リジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 345, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

15

実施例 1 1-0492

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(ベンジルオキシ)アセチル]ピ
ペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 403 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0493

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-メチルブタノイル)ピペリ
ジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0494

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メトキシフェニル) アセチ
ル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 247 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0495

エチル 5-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
10 アミノ] ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル) -5-オキソペンタ
ノアート

MS(ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 393, 221 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

15 実施例 11-0496

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(シクロブチルカルボニル) ピペ
リジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 427 (M + H)⁺, 345, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

20

実施例 11-0497

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-エチルブタノイル) ピペリ
ジン-4-イル] ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 345 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0498

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[4-(トリフルオロメトキシ)ペンゾイル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 533 (M + H)⁺, 189 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0499

10 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(メチルスルホニル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 423 (M + H)⁺, 262 (M + 2H)²⁺, 212 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0500

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ペンチルスルホニル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 957 (2M + H)⁺, 479 (M + H)⁺, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

20 実施例 11-0501

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(プロピルスルホニル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 901 (2M + H)⁺, 451 (M + H)⁺, 226 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

25

実施例 11-0502

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(イソプロピルスルホニル)ピペ
リジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 901 (2M + H)⁺, 451 (M + H)⁺, 226 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

5

実施例 11-0503

4-アゼパン-1-イル-N-(1-ピペリジン-4-イルピロリジン-3
-イル)ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 345 (M + H)⁺, 262, 173 (M + 2H)²⁺;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.79。

実施例 11-0504

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ブチルスルホニル)ピペリジ
ン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 929 (2M + H)⁺, 465 (M + H)⁺, 233 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0505

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(フェニルスルホニル)ピペリジ
ン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 969 (2M + H)⁺, 485 (M + H)⁺, 243 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.13。

実施例 11-0506

25 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-クロロフェニル)スルホニ
ル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521, 519 ($M + H$)⁺, 260($M + 2H$)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0507

5 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-[4-(トリフルオロメチル)
フェニル]スルホニルピペリジン-4-イル)ピロリジン-3-イル]ピリ
ミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 553 ($M + H$)⁺, 277 ($M + 2H$)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

10

実施例 11-0508

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メトキシフェニル)スルホ
ニル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミ
ン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 515 ($M + H$)⁺, 345, 258 ($M + 2H$)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0509

20

4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(ペンジルスルホニル)ピペリジ
ン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 ($2M + H$)⁺, 499 ($M + H$)⁺, 345 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0510

25

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-メチルフェニル)スルホニ
ル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0511

5 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(3-メチルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

10 実施例 11-0512

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(2-メチルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

15

実施例 11-0513

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-[4-(トリフルオロメトキシ) フェニル] スルホニルピペリジン-4-イル) ピロリジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 569 (M + H)⁺, 285 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 11-0514

25 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-ブトキシフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 557 (M + H)⁺, 345, 279 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0515

5 4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-tert-ブチルフェニル)スルホニル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 541 (M + H)⁺, 271 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

10

実施例 11-0516

4-アゼパン-1-イル-N-(1-1-[(4-ニトロフェニル)スルホニル]ピペリジン-4-イルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 530 (M + H)⁺, 278 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0517

4-[(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピロリジン-1-イルピペリジン-1-イル)スルホニル]ベンゾニトリル

20 MS (ESI, Pos.20V) : 510 (M + H)⁺, 255.5 (M + 2H)²⁺, 186 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0518

25 4-アゼパン-1-イル-N-1-[1-(2-ナフチルスルホニル)ピペリジン-4-イル]ピロリジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 535 (M + H)⁺, 268(M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0519

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-イソブチル-
5 ル-1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 359, 276, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0520

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-ブチル-
1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 359, 276, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

15 実施例 11-0521

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (3-メチ
ルベンゾイル) -1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 239 (M + 2H)²⁺, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 11-0522

1'-アセチル-N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -
1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 359, 276, 201 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 1 1-0 5 2 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (4-フル
オロベンゾイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 481 (M + H)⁺, 359, 241 (M + 2H)²⁺, 123 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0 5 2 4

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (4-メチ
ルベンゾイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 239 (M + 2H)²⁺, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 5 2 5

15 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-ヘプタノイ
ル-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 359, 236 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 1 1-0 5 2 6

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-メト
キシベンゾイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 359, 247 (M + 2H)²⁺, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

25 実施例 1 1-0 5 2 7

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-メチ

ルベンゾイル) - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 239 (M + 2H)²⁺, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

5 実施例 11-0528

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - ヘキサノイル - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359, 276, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

10

実施例 11-0529

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (フェニルアセチル) - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 239 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0530

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (4 - メトキシベンゾイル) - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 359, 247 (M + 2H)²⁺, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0531

25 N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - [(2E) - 3 - フェニルプロパー - 2 - エノイル] - 1, 3' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 489 (M + H)⁺, 359, 245 (M + 2H)²⁺, 204 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0532

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-プロピオニ
ル-1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 359, 276, 208 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

10 実施例 11-0533

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロブ
ロピルカルボニル) -1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 427 (M + H)⁺, 359, 276, 214 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

15

実施例 11-0534

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-クロ
ロベンゾイル) -1, 3'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499, 497 (M + H)⁺, 359, 249 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0535

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロヘ
キシルカルボニル) -1, 3'-ビペリジン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 359, 235 (M + 2H)²⁺, 111 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0536

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-フロ
イル)-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 453 (M + H)⁺, 276, 227 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0537

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-ペンタノイ
ル-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 359, 222 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0538

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(フェノキ
シアセチル)-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 276, 247 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20 実施例 11-0539

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-オクタノイ
ル-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 359, 243 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

25

実施例 11-0540

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3-フェニルプロパノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 359, 246 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

5

実施例 1 1-0 5 4 1

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - [2- (トリフルオロメチル) ベンゾイル] -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 531 (M + H)⁺, 266 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0 5 4 2

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (2-ナフトイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 359, 257 (M + 2H)²⁺, 155 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 1-0 5 4 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (チエン-2-イルアセチル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 276, 242 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0 5 4 4

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3, 3-ジメチルブタノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0 5 4 5

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3-メトキシベンゾイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 359, 247 (M + 2H)²⁺, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

10 実施例 1 1-0 5 4 6

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (2-エチルヘキサノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 359, 243 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

15

実施例 1 1-0 5 4 7

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3-フルオロベンゾイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 481 (M + H)⁺, 359, 241 (M + 2H)²⁺, 123 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0 5 4 8

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3-クロロベンゾイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 499, 497 (M + H)⁺, 359, 249 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0549

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(4-tert-ブチルベンゾイル)-1,3'-ビペリジン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 519 (M+H)⁺, 359, 260 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.31。

実施例 11-0550

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(チエン-2-イルカルボニル)-1,3'-ビペリジン-3-アミン

10

MS(ESI, Pos.20V): 469 (M+H)⁺, 359, 235 (M+2H)²⁺, 111;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0551

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-クロロフェニル)アセチル]-1,3'-ビペリジン-3-アミン

15

MS(ESI, Pos.20V): 513, 511 (M+H)⁺, 256 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.20。

実施例 11-0552

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3-メチルブタノイル)-1,3'-ビペリジン-3-アミン

20

MS(ESI, Pos.20V): 443 (M+H)⁺, 359, 222 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

実施例 11-0553

25

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [4- (トリフルオロメチル) ベンゾイル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 531 (M + H)⁺, 266 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

5

実施例 11-0554

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- ベンゾイル
-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 463 (M + H)⁺, 359, 232 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0555

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-フル
オロベンゾイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V) : 481 (M + H)⁺, 359, 241 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0556

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (ジフェニ
20 ルアセチル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 553 (M + H)⁺, 359, 277 (M + 2H)²⁺, 167 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0557

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-フェ
ノキシプロパノイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 254 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0558

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (2-メチルペンタノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

10 実施例 11-0559

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (メトキシアセチル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 431 (M + H)⁺, 359, 216 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

15

実施例 11-0560

エチル 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
-1, 3' -ピペリジン-1' -イル-4-オキソブタノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 359, 244 (M + 2H)²⁺, 211 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

実施例 11-0561

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (3-シクロペンチルプロパノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 359, 242 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0562

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-プロ
ピルペンタノイル)-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 359, 243 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0563

メチル 5-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
10 -1, 3'-ビピペリジン-1'-イル-5-オキソペンタノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 228 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0564

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-クロ
ロフェノキシ)アセチル]-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 529, 527 (M + H)⁺, 264 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

20 実施例 11-0566

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロペ
ンチルアセチル)-1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 359, 235 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

25

実施例 11-0567

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロペンチルカルボニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 359, 228 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

5

実施例 11-0568

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (メシチルカルボニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 359, 147 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0569

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(3-メトキシフェニル) アセチル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 359, 254 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0570

エチル 3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -1, 3'-ビピペリジン-1'-イル-3-オキソプロパノアート

20

MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 276, 237 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0571

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (4-ブトキシベンゾイル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 535 (M + H)⁺, 359, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

実施例 1 1-0 5 7 2

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - [(ベンジル
オキシ) アセチル] -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 417 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

10 実施例 1 1-0 5 7 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - (2-メチ
ルブタノイル) -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 465 (M + Na)⁺, 443 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

15

実施例 1 1-0 5 7 4

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1' - [(4-メト
キシフェニル) アセチル] -1, 3' -ピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 359, 254(M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0 5 7 5

エチル 5-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
-1, 3' -ピペリジン-1' -イル-5-オキソペンタノアート

25 MS (ESI, Pos.20V) : 501 (M + H)⁺, 228 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0576

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロブチルカルボニル)-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 441 (M+H)⁺, 359, 221 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0577

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-エチルブタノイル)-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 457 (M+H)⁺, 359, 229 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0578

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[4-(トリフルオロメトキシ)ベンゾイル]-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 547 (M+H)⁺, 359, 274 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.25。

20 実施例 11-0579

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(メチルスルホニル)-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 437 (M+H)⁺, 359, 276;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.96。

25

実施例 11-0580

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (ペンチルスルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 276, 247 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

5

実施例 11-0581

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (プロピルスルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 465 (M + H)⁺, 276, 233 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0582

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (イソプロピルスルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 465 (M + H)⁺, 359, 276, 233 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0583

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 359 (M + H)⁺, 276 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

実施例 11-0584

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (ブチルスルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 479 (M + H)⁺, 276, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0585

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (フェニル
スルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 276, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10 実施例 11-0586

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(4-クロ
ロフェニル) スルホニル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 535, 533 (M + H)⁺, 267 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

15

実施例 11-0587

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [4- (ト
リフルオロメチル) フェニル] スルホニル-1, 3'-ビピペリジン-3-
アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 567 (M + H)⁺, 284 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0588

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(4-メト
キシフェニル) スルホニル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 529 (M + H)⁺, 265 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0589

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (ベンジル
スルホニル) -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 359, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0590

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(4-メチ
ルフエニル) スルホニル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

15 実施例 1 1-0591

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(3-メチ
ルフエニル) スルホニル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

20

実施例 1 1-0592

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(2-メチ
ルフエニル) スルホニル] -1, 3'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0593

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]スルホニル-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 583 (M+H)⁺, 292 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.33。

実施例 11-0594

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-ブトキシフェニル)スルホニル]-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 571 (M+H)⁺, 286 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.42。

実施例 11-0595

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-tert-ブチルフェニル)スルホニル]-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 555 (M+H)⁺, 278 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.38。

20

実施例 11-0596

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-ニトロフェニル)スルホニル]-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 544 (M+H)⁺, 272.5 (M+2H)²⁺;

25 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.20。

実施例 11-0597

4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-1,3'-ビピペリジン-1'-イルスルホニル)ベンゾニトリル

MS (ESI, Pos.20V) : 524 (M + H)⁺, 262.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0598

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-ナフチルスルホニル)-1,3'-ビピペリジン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 549 (M + H)⁺, 275 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0599

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-イソブチリル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 359 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0600

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-ブチリル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 359, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

25 実施例 11-0601

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3-メチ

ルベンゾイル) - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

5 実施例 11-0602

1' - アセチル - N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) -
1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 401 (M + H)⁺, 359, 276, 201 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

10

実施例 11-0603

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (4 - フル
オロベンゾイル) - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 481 (M + H)⁺, 359, 123 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0604

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (4 - メチ
ルベンゾイル) - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0605

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - ヘプタノイ
25 ル - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 236 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0606

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-メトキシベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 359, 193, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0607

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-メチルベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

15 実施例 11-0608

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-ヘキサノイル-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359, 229 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 11-0609

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (フェニルアセチル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 359, 239 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0610

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(4-メトキシベンゾイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 493 (M+H)⁺, 359, 193, 135 ;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0611

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(2E)-3-フェニルプロパー-2-エノイル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミ
10 ン

MS(ESI, Pos.20V): 977 (2M+H)⁺, 489 (M+H)⁺, 359 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 11-0612

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-プロピオニル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 415 (M+H)⁺, 359, 180 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.90。

20 実施例 11-0613

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロプロピルカルボニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 427 (M+H)⁺, 359 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.94。

25

実施例 11-0614

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-クロロベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499, 497 (M + H)⁺, 359, 249 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 11-0615

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロヘキシルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 359 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0616

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-フロイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 453 (M + H)⁺, 359, 227 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0617

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- ペンタノイル-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 359, 222 (M + 2H)²⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0618

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (フェノキシアセチル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 493 (M + H)⁺, 443, 247 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0619

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'-オクタノイル-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 359, 243 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

10 実施例 11-0620

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (3-フェニルプロパノイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 359, 246 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

15

実施例 11-0621

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [2- (トリフルオロメチル) ベンゾイル] -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 531 (M + H)⁺, 359, 266 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0622

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-ナフトイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 359, 155 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0 6 2 3

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(チエン-2-イルアセチル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 483 (M+H)⁺, 242 (M+2H)²⁺, 193 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

実施例 1 1-0 6 2 4

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3, 3-ジメチルブタノイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 457 (M+H)⁺, 359, 180 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

実施例 1 1-0 6 2 5

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3-メトキシベンゾイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 493 (M+H)⁺, 359, 193, 135 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

20 実施例 1 1-0 6 2 6

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-エチルヘキサノイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 485 (M+H)⁺, 359 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.20。

25

実施例 1 1-0 6 2 7

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (3-フル
オロベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 481 (M + H)⁺, 359, 241 (M + 2H)²⁺, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 11-0628

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (3-クロ
ロベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499, 497 (M + H)⁺, 359, 249 (M + 2H)²⁺, 139

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0629

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (4-t e
r t-ブチルベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 519 (M + H)⁺, 359, 161 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0630

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (チエン-
2-イルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 359, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0631

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(4-クロ
ロフェニル) アセチル] -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513, 511 ($M + H$)⁺, 359, 256 ($M + 2H$)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 1-0 6 3 2

- 5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (3-メチルブタノイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 ($M + H$)⁺, 359, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

10 実施例 1 1-0 6 3 3

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [4- (トリフルオロメチル) ベンゾイル] -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 531 ($M + H$)⁺, 266 ($M + 2H$)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

15

実施例 1 1-0 6 3 4

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- ベンゾイル
-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 463 ($M + H$)⁺, 359, 193

- 20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 1 1-0 6 3 5

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (2-フル
オロベンゾイル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

- 25 MS (ESI, Pos.20V) : 481 ($M + H$)⁺, 359, 241 ($M + 2H$)²⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0636

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(ジフェニ
ルアセチル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 553 (M + H)⁺, 359, 277 (M + 2H)²⁺, 167 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0637

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-フェ
ノキシプロパノイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 359, 254 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0638

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-メチ
ルペンタノイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

20 実施例 11-0639

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(メトキシ
アセチル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 431 (M + H)⁺, 359, 276, 216 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

25

実施例 11-0640

エチル 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
-1, 4'-ビピペリジン-1'-イル-4-オキソブタノアート

MS(ESI, Pos.20V): 487 (M + H)⁺, 244 (M + 2H)²⁺, 221 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

5

実施例 11-0641

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(3-シクロ
ベンチルプロパノイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 483 (M + H)⁺, 359, 242 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0642

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-プロ
ピルペンタノイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 485 (M + H)⁺, 359 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0643

メチル 5-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
20 -1, 4'-ビピペリジン-1'-イル-5-オキソペンタノアート

MS(ESI, Pos.20V): 487 (M + H)⁺, 228 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0644

25 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-クロ
ロフェノキシ)アセチル]-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 529, 527 (M + H)⁺, 264 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0646

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (シクロペンチルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 359, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

10 実施例 11-0647

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (メシチルカルボニル) -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 359, 267, 147 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

15

実施例 11-0648

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- [(3-メトキシフェニル) アセチル] -1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 359, 254 (M + 2H)²⁺, 180 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0649

エチル 3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -1, 4'-ビピペリジン-1'-イル-3-オキソプロパノアート

25 MS (ESI, Pos.20V) : 473 (M + H)⁺, 359, 237 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0650

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(4-ブトキシベンゾイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 535 (M+H)⁺, 359, 177;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.27。

実施例 11-0651

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(ベンジルオキシ)アセチル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 507 (M+H)⁺, 417;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

実施例 11-0652

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-メチルブタノイル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 443 (M+H)⁺, 359, 193;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.01。

20 実施例 11-0653

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-メトキシフェニル)アセチル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 507 (M+H)⁺, 359, 254 (M+2H)²⁺, 121;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

25

実施例 11-0654

エチル 5-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
-1, 4'-ビピペリジン-1'-イル-5-オキソペンタノアート

MS(ESI, Pos.20V) : 501 (M + H)⁺, 251 (M + 2H)²⁺, 228 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

5

実施例 1 1-0 6 5 5

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロブ
チルカルボニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 441 (M + H)⁺, 359, 193 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0 6 5 6

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(2-エチ
ルブタノイル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 359 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 1-0 6 5 7

1 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[4-(ト
20 リフルオロメトキシ)ベンゾイル]-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 547 (M + H)⁺, 359, 189 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 1-0 6 5 8

25 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(メチルス
ルホニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 437 (M + H)⁺, 276, 219 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 11-0659

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (ペンチルスルホニル) -1, 4'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 985 (2M + H)⁺, 493 (M + H)⁺, 247 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

10 実施例 11-0660

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (プロピルスルホニル) -1, 4'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 929 (2M + H)⁺, 465 (M + H)⁺, 233 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

15

実施例 11-0661

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1'- (イソプロピルスルホニル) -1, 4'-ビペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 929 (2M + H)⁺, 465 (M + H)⁺, 233 (M + 2H)²⁺ ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0662

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1, 4'-ビペリジン-3-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 359 (M + H)⁺, 276, 180 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

実施例 11-0663

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(ブチルスルホニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 957 (2M + H)⁺, 479 (M + H)⁺, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0664

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(フェニルスルホニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 997 (2M + H)⁺, 499 (M + H)⁺, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0665

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-クロロフェニル)スルホニル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 535, 533 (M + H)⁺, 267 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

20 実施例 11-0666

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[4-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニル-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 567 (M + H)⁺, 284 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0667

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-メトキシフェニル)スルホニル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 529 (M + H)⁺, 359, 265 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0668

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(ベンジルスルホニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 359 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0669

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-メチルフエニル)スルホニル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺, 238 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0670

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(3-メチルフエニル)スルホニル]-1,4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

25 実施例 11-0671

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(2-メチ

ルフェニル) スルホニル] - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 276, 257 (M + 2H)²⁺, 238 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5 実施例 11-0672

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - [4 - (トリフルオロメトキシ) フェニル] スルホニル - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 583 (M + H)⁺, 292 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

実施例 11-0673

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - [(4 - ブトキシフェニル) スルホニル] - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 571 (M + H)⁺, 359, 286 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.38。

実施例 11-0674

20 N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - [(4 - tert - ブチルフェニル) スルホニル] - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 555 (M + H)⁺, 278 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.38。

25 実施例 11-0675

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - [(4 - ニト

ロフェニル) スルホニル] - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 544 (M + H)⁺, 292 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5 実施例 11-0676

4 - (3 - [(4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] - 1, 4' - ビピペリジン - 1' - イルスルホニル) ベンゾニトリル

MS (ESI, Pos.20V) : 524 (M + H)⁺, 262.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10

実施例 11-0677

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1' - (2 - ナフチルスルホニル) - 1, 4' - ビピペリジン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 549 (M + H)⁺, 275 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0678

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1 - (1 - イソブチリルピペリジン - 3 - イル) アゼパン - 3 - アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 373, 290, 222(M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0679

25

N - (4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) - 1 - (1 - ブチリルピペリジン - 3 - イル) アゼパン - 3 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 290, 222(M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0680

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-
メチルベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 373, 246 (M + 2H)²⁺, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 1 1-0681

10 1- (1-アセチルピペリジン-3-イル) -N- (4-アゼパン-1-イ
ルピリミジン-2-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 373, 290, 208 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

15 実施例 1 1-0682

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-
フルオロベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 495 (M + H)⁺, 373, 248 (M + 2H)²⁺, 130 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 1 1-0683

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-
メチルベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 373, 246 (M + 2H)²⁺, 119 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0684

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-ヘプタ
ノイルピペリジン-3-イル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 485 (M+H)⁺, 290, 243 (M+2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.27。

実施例 11-0685

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-
メトキシベンゾイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

10 MS(ESI, Pos.20V): 507 (M+H)⁺, 373, 254 (M+2H)²⁺, 135;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

実施例 11-0686

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-
15 メチルベンゾイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 491 (M+H)⁺, 373, 246 (M+2H)²⁺, 119;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 11-0687

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-ヘキサ
ノイルピペリジン-3-イル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 471 (M+H)⁺, 373, 290, 236 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.16。

25 実施例 11-0688

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(フェ

ニルアセチル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 290, 246 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

5 実施例 11-0689

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-
メトキシベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 373, 254 (M + 2H)²⁺, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

10

実施例 11-0690

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(2E)
-3-フェニルプロパ-2-エノイル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3
-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 503 (M + H)⁺, 373, 252 (M + 2H)²⁺, 131 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0691

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-プロピ
20 オニルピペリジン-3-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 290, 215 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0692

25

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (シク
ロプロピルカルボニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 441 (M + H)⁺, 373, 290, 221 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0693

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-クロロベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513, 511 (M + H)⁺, 256 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

10 実施例 11-0694

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (シクロヘキシルカルボニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373, 242 (M + 2H)²⁺, 111 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

15

実施例 11-0695

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-フロイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 290, 234 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0696

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ペンタノイルピペリジン-3-イル) アゼパン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 290, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0697

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(フェ
ノキシアセチル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 507, (M + H)⁺, 457, 290, 254 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0698

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-オクタ
ノイルピペリジン-3-イル)アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 373, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

実施例 11-0699

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3-
フェニルプロパノイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 253 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

20 実施例 11-0700

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[2-(ト
リフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミ
ン

MS (ESI, Pos.20V) : 545 (M + H)⁺, 273 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0701

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-ナフトイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 527 (M+H)⁺, 373, 264 (M+2H)²⁺, 155;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.22。

実施例 11-0702

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(チエン-2-イルアセチル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

10 MS(ESI, Pos.20V): 497 (M+H)⁺, 290, 249 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 11-0703

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3, 3-ジメチルブタノイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 471 (M+H)⁺, 373, 236 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.14。

実施例 11-0704

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3-メトキシベンゾイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 507 (M+H)⁺, 373, 254 (M+2H)²⁺, 135;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

25 実施例 11-0705

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-

エチルヘキサノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 373, 250 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

5 実施例 11-0706

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-フルオロベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 495 (M + H)⁺, 290, 248 (M + 2H)²⁺, 206 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

10

実施例 11-0707

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-クロロベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513, 511 (M + H)⁺, 290, 256 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0708

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-tert-ブチルベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 533 (M + H)⁺, 373, 267 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 11-0709

25

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (チエン-2-イルカルボニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373, 242 (M + 2H)²⁺, 111 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0710

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-クロロフェニル) アセチル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527, 525 (M + H)⁺, 263 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

10 実施例 11-0711

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-メチルブタノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 373, 290, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

15

実施例 11-0712

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [4- (トリフルオロメチル) ベンゾイル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 545 (M + H)⁺, 273 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0713

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ベンゾイルピペリジン-3-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 477 (M + H)⁺, 373, 239 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0714

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-フルオロベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 495 (M + H)⁺, 290, 248 (M + 2H)²⁺, 206 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0715

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (ジフェニルアセチル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 567 (M + H)⁺, 373, 284, (M + 2H)²⁺, 167 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

15 実施例 1 1-0716

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-フェノキシプロパノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 261 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

20

実施例 1 1-0717

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-メチルペンタノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 373, 236 (M + 2H)²⁺ ;

25

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0718

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(メトキシアセチル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 445 (M+H)⁺, 373, 290, 223 (M+2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.92。

実施例 11-0719

エチル 4-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル)-4-オキソブタノア

10 ート

MS(ESI, Pos.20V): 501 (M+H)⁺, 251 (M+2H)²⁺, 228;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

実施例 11-0720

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3-シクロペンチルプロパノイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 497 (M+H)⁺, 373, 249 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.27。

20

実施例 11-0721

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-プロピルペンタノイル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 499 (M+H)⁺, 373, 250 (M+2H)²⁺;

25 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.29。

実施例 11-0722

メチル 5-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル)-5-オキソペンタノアート

5 MS(ESI, Pos.20V) : 501 (M + H)⁺, 235 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0723

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-クロロフェノキシ)アセチル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 543, 541 (M + H)⁺, 271 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0725

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(シクロペンチルアセチル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373, 242 (M + 2H)²⁺, 111 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

20 実施例 11-0726

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(シクロペンチルカルボニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 373, 235 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

25

実施例 11-0727

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (メシ
チルカルボニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 519 (M + H)⁺, 373, 147 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

5

実施例 11-0728

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(3-メ
トキシフェニル) アセチル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 261 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0729

エチル 3- (3-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル) -3-オキソプロパノ
15 アート

MS (ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 290, 244 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0730

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-
ブトキシベンゾイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 549 (M + H)⁺, 373, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

25 実施例 11-0731

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(ベンジ

ルオキシ) アセチル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 431 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

5 実施例 11-0732

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-メチルブタノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 373, 290, 229 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

10

実施例 11-0733

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-メトキシフェニル) アセチル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 261 (M + 2H)²⁺, 121 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0734

エチル 5-(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル)-5-オキソペンタノ
20 アート

MS (ESI, Pos.20V) : 515 (M + H)⁺, 235 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0735

25

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(シクロブチルカルボニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 373, 290, 228 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0736

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-[1-(2-エチルブタノイル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 373, 236 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10 実施例 11-0737

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1-[4-(トリフルオロメトキシ) ベンゾイル] ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 561 (M + H)⁺, 373, 281 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0738

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-[1-(メチルスルホニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 451 (M + H)⁺, 373, 290, 226 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0739

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-[1-(ベンチルスルホニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 290, 254 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 1 1-0740

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(プロ
5 ピルスルホニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 479 (M+H)⁺, 290, 240 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0741

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(イソ
プロピルスルホニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 479 (M+H)⁺, 290, 240 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

15 実施例 1 1-0742

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-ピペリジン-
3-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 745 (2M+H)⁺, 373 (M+H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

20 実施例 1 1-0743

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(ブチ
ルスルホニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 493 (M+H)⁺, 290, 247 (M+2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0744

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(フェニルスルホニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 290, 257 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0745

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-クロロフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 549, 547 (M + H)⁺, 274 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0746

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-[4-(トリフルオロメチル)フェニル]スルホニル)ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 581 (M + H)⁺, 291 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

20 実施例 11-0747

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-メトキシフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 543 (M + H)⁺, 272 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

25

実施例 11-0748

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(ベン
ジルスルホニル)ピペリジン-3-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 527 (M+H)⁺, 373, 264 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.20。

5

実施例 11-0749

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-メ
チルフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 527 (M+H)⁺, 290, 264 (M+2H)²⁺;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.21。

実施例 11-0750

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(3-メ
チルフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 527 (M+H)⁺, 290, 264 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.23。

実施例 11-0751

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(2-メ
チルフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 527 (M+H)⁺, 290, 264 (M+2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.22。

実施例 11-0752

25 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-[4-
(トリフルオロメトキシ)フェニル]スルホニルピペリジン-3-イル)ア

ゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 597 (M + H)⁺, 299 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

5 実施例 11-0753

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-ブ
トキシフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 585 (M + H)⁺, 293 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.44。

10

実施例 11-0754

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-tert-
butylフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-
アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 569 (M + H)⁺, 285 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0755

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-ニ
トロフェニル)スルホニル]ピペリジン-3-イルアゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 558 (M + H)⁺, 279.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0756

4-[(3-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]
アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル)スルホニル]ベンゾニトリル

25

MS (ESI, Pos.20V) : 538 (M + H)⁺, 269.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0757

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
ナフチルスルホニル) ピペリジン-3-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 563 (M + H)⁺, 282 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

10 実施例 11-0758

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-イソブ
チリルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

15

実施例 11-0759

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ブチリ
ルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 443 (M + H)⁺, 373, 187 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0760

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-
メチルベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 373, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0761

1- (1-アセチルピペリジン-4-イル) -N- (4-アゼパン-1-イル)
ピリミジン-2-イル) アゼパン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 415 (M + H)⁺, 373, 290, 187 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0762

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-フルオロベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 495 (M + H)⁺, 373, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0763

15 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-メチルベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 373, 119 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

20 実施例 11-0764

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ヘプタノイルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 485 (M + H)⁺, 373, 243 (M + 2H)²⁺, 187 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

25

実施例 11-0765

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-メトキシベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 373, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 11-0766

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-メチルベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 981 (2M + H)⁺, 491 (M + H)⁺, 373, 119 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0767

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ヘキサノイルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 373, 236 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0768

20 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (フェニルアセチル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 491 (M + H)⁺, 373, 246 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0769

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-メトキシベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 373, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0770

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(2E)
-3-フェニルプロパ-2-エノイル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3
-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 503 (M + H)⁺, 373, 131 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10

実施例 11-0771

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-プロピ
オニルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 429 (M + H)⁺, 373, 215 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0772

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (シク
ロプロピルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 441 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0773

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
クロロベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513, 511 (M + H)⁺, 373, 256 (M + 2H)²⁺, 139 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0774

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (シクロヘキシルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 1-0775

10 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-フロイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 467 (M + H)⁺, 234 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

15 実施例 1 1-0776

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1-ペンタノイルピペリジン-4-イル) アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 373, 187 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

20

実施例 1 1-0777

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (フェノキシアセチル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 254 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0778

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-オクタ
ノイルピペリジン-4-イル)アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 373, 250 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0779

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3-
フェニルプロパノイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 505 (M + H)⁺, 373, 253 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0780

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[2-(ト
リフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミ
ン

MS (ESI, Pos.20V) : 545 (M + H)⁺, 373, 273 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20 実施例 11-0781

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-
ナフトイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527 (M + H)⁺, 373, 155 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

25

実施例 11-0782

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (チエ
ン-2-イルアセチル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 497 (M + H)⁺, 249 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 11-0783

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3,
3-ジメチルブタノイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 373, 187 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0784

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-
メトキシベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 373, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0785

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
20 エチルヘキサノイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0786

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-
フルオロベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 495 (M + H)⁺, 373, 248 (M + 2H)²⁺, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0787

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (3-クロロベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513, 511 (M + H)⁺, 373, 256 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

10 実施例 11-0788

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (4-tert-ブチルベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 533 (M + H)⁺, 373, 161 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-0789

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (チエン-2-イルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373, 111 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0790

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-クロロフェニル) アセチル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527, 525 (M + H)⁺, 263 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 1 1-0791

5 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(3-
メチルブタノイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 457 (M+H)⁺, 373, 187 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0792

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[4-(ト
リフルオロメチル)ベンゾイル]ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミ
ン

MS(ESI, Pos.20V) : 545 (M+H)⁺, 273 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.19。

15

実施例 1 1-0793

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-ベンゾ
イルピペリジン-4-イル)アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 477 (M+H)⁺, 373 ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0794

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-
フルオロベンゾイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

25

MS(ESI, Pos.20V) : 495 (M+H)⁺, 373, 248 (M+2H)²⁺, 123 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0795

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(ジフェニルアセチル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 567 (M+H)⁺, 373, 284 (M+2H)²⁺, 167 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.27。

実施例 11-0796

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-フェノキシプロパノイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 521 (M+H)⁺, 373, 261 (M+2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0797

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-メチルペンタノイル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 471 (M+H)⁺, 373 ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

20 実施例 11-0798

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(メトキシアセチル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 445 (M+H)⁺, 373, 290, 223 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.90。

25

実施例 11-0799

エチル 4- (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル) -4-オキソブタノア
ート

MS (ESI, Pos.20V) : 501 (M + H)⁺, 251 (M + 2H)²⁺, 228 ;

5 HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0800 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イ
ル) -1- [1- (3-シクロペンチルプロパノイル) ピペリジン-4-イ
10 ル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 497 (M + H)⁺, 373, 249 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0801

15 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
プロピルペンタノイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 499 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

20 実施例 11-0802

メチル 5- (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル) -5-オキソペンタノ
アート

MS (ESI, Pos.20V) : 501 (M + H)⁺, 235 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0803

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[(4-クロロフェノキシ) アセチル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 543, 541 (M + H)⁺, 271 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0805

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(シクロペンチルアセチル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 483 (M + H)⁺, 373, 242 (M + 2H)²⁺, 187 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0806

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(シクロペンチルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 469 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0807

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(メシチルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 519 (M + H)⁺, 373, 147 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25 実施例 11-0808

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(3-メ

トキシフェニル) アセチル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 261 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

5 実施例 11-0809

エチル 3-(4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル)-3-オキソプロパノアート

MS (ESI, Pos.20V) : 487 (M + H)⁺, 373, 244 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0810

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(4-ブトキシベンゾイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 549 (M + H)⁺, 373, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0811

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(ベンジルオキシ) アセチル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 431 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0812

25 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(2-メチルブタノイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 457 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0813

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-メ
トキシフェニル) アセチル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 521 (M + H)⁺, 373, 261 (M + 2H)²⁺, 121 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

10 実施例 11-0814

エチル 5- (4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)
アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル) -5-オキソペンタノ
アート

MS (ESI, Pos.20V) : 515 (M + H)⁺, 235 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0815

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (シク
ロブチルカルボニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 455 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0816

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-
エチルブタノイル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 471 (M + H)⁺, 373 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0817

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[4-(トリフルオロメトキシ)ベンゾイル]ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 561 (M + H)⁺, 373, 274 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

10 実施例 11-0818

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(メチルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 901 (2M + H)⁺, 451 (M + H)⁺, 226 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

15

実施例 11-0819

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(ペンチルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 507 (M + H)⁺, 373, 254 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0820

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(プロピルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 957 (2M + H)⁺, 479 (M + H)⁺, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0821

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(イソ
プロピルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 957 (2M + H)⁺, 479 (M + H)⁺, 240 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0822

10 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-ピペリジン-
4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 373 (M + H)⁺, 290, 187 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

実施例 11-0823

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(ブチ
ルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 985 (2M + H)⁺, 493 (M + H)⁺, 247 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

20 実施例 11-0824

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-[1-(フェ
ニルスルホニル)ピペリジン-4-イル]アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 513 (M + H)⁺, 290, 257 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25

実施例 11-0825

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-クロロフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン
MS (ESI, Pos.20V) : 549, 547 (M + H)⁺, 274 (M + 2H)²⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

5

実施例 11-0826

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- (1- [4-
(トリフルオロメチル) フェニル] スルホニルピペリジン-4-イル) アゼ
パン-3-アミン

10

MS (ESI, Pos.20V) : 581 (M + H)⁺, 291 (M + 2H)²⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

実施例 11-0827

15

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-メ
トキシフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン
MS (ESI, Pos.20V) : 543 (M + H)⁺, 373, 272 (M + 2H)²⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-0828

20

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (ベン
ジルスルホニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン
MS (ESI, Pos.20V) : 527 (M + H)⁺, 373 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25

実施例 11-0829

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-メ

チルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527 (M + H)⁺, 264 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

5 実施例 11-0830

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(3-メ
チルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527 (M + H)⁺, 264 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

10

実施例 11-0831

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(2-メ
チルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 527 (M + H)⁺, 290, 264 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0832

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-(1-[4-
(トリフルオロメトキシ)フェニル] スルホニルピペリジン-4-イル) ア
ゼパン-3-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 597 (M + H)⁺, 299 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 11-0833

25

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1-1-[(4-ブ
トキシフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 585 (M + H)⁺, 373, 293 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0834

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-tert-ブチルフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 569 (M + H)⁺, 285 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

10

実施例 11-0835

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1-1- [(4-ニトロフェニル) スルホニル] ピペリジン-4-イルアゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 558 (M + H)⁺, 279.5 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0836

4- [(4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼパン-1-イルピペリジン-1-イル) スルホニル] ベンゾニトリル

20

MS (ESI, Pos.20V) : 538 (M + H)⁺, 269.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0837

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -1- [1- (2-ナフチルスルホニル) ピペリジン-4-イル] アゼパン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 563 (M + H)⁺, 282 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 1 1-0 8 3 8

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(1-メチル-1H-ピロール-2-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 341 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0 8 3 9

4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)-1,5-ジメチル-2-フェニル-1,2-ジヒドロ-3H-ピラゾール-3-オン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 895 (2M + H)⁺, 448 (M + H)⁺, 290, 201 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0 8 4 0

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 328 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 1 1-0 8 4 1

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(5-メチル-2-フリル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 342 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0842

[5-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル)-2-フリル] メチル アセタート

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 400 (M + H)⁺, 290, 193 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0843

10 [5-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル)-2-フリル] メタノール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 358 (M + H)⁺, 248 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

実施例 11-0844

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-3-(2-フリル) プロパー 2-エニル] アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 354 (M + H)⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

20 実施例 11-0845

4-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルアゼチジン-3-イル) ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 338 (M + H)⁺, 290, 248, 193 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

25

実施例 11-0846

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-メトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 368 (M+H)⁺, 248, 193;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.00。

5

実施例 11-0847

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2, 3-ジメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 795 (2M+H)⁺, 398 (M+H)⁺, 248;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.01。

実施例 11-0848

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2, 4-ジメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 795 (2M+H)⁺, 398 (M+H)⁺, 151;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0849

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2, 4, 6-トリメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20 MS(ESI, Pos. 20 V): 855 (2M+H)⁺, 428 (M+H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07。

実施例 11-0850

25 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2, 5-ジメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 795 (2M + H)⁺, 398 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 1 1-0851

5 [2-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル) フェノキシ] 酢酸

MS (ESI, Pos. 20 V) : 412 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

10 実施例 1 1-0852

4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(トリフルオロメチル) ベンジル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 406 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

15

実施例 1 1-0853

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-メチルベンジル) アゼチジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺, 276, 193 ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 1 1-0854

3-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル) ベンゾニトリル

25

MS (ESI, Pos. 20 V) : 363 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0855

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-フルオロベンジル)アゼチジン
-3-イル]ピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 356 (M + H)⁺, 290, 193 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 1 1-0856

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-フルオロ-4-メトキシベンジ
ル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 771 (2M + H)⁺, 386 (M + H)⁺, 248 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 1-0857

15 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-フェノキシベンジル)アゼチジ
ン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 859 (2M + H)⁺, 430 (M + H)⁺, 183 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

20 実施例 1 1-0858

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-メトキシベンジル)アゼチジン
-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 368 (M + H)⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

25

実施例 1 1-0859

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3,4-ジメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 795 (2M + H)⁺, 398 (M + H)⁺, 248, 193 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.00。

5

実施例 11-0860

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3,4,5-トリメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 855 (2M + H)⁺, 428 (M + H)⁺, 181 ;

10 HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0861

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ベンジルオキシ)-3-メトキシベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 947 (2M + H)⁺, 474 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.27。

実施例 11-0862

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3-(ベンジルオキシ)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

20

MS(ESI, Pos. 20 V): 887 (2M + H)⁺, 444 (M + H)⁺, 197 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.23。

実施例 11-0863

25

3-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)フェノール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 354 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0864

5 5- (3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル) -2-メトキシフェノール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 384 (M + H)⁺, 290, 248, 137 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

10 実施例 11-0865

4-アゼパン-1-イル-N-1- [3- (トリフルオロメチル) ベンジル] アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 406 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

15

実施例 11-0866

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (3-メチルベンジル) アゼチジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺, 248 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0867

4- (3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル) ベンゾニトリル

25 MS (ESI, Pos. 20 V) : 363 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0868

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-フルオロベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 356 (M + H)⁺, 263 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0869

N-[4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)フェニル]アセトアミド

10 MS (ESI, Pos. 20 V) : 789 (2M + H)⁺, 395 (M + H)⁺, 193 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0870

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ジメチルアミノ)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 381 (M + H)⁺, 248, 191 (M + 2H)²⁺, 134 ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0871

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ジエチルアミノ)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 817 (2M + H)⁺, 409 (M + H)⁺, 205 (M + 2H)²⁺ ;
HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

実施例 11-0872

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-フェノキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 859 (2M + H)⁺, 430 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

5

実施例 11-0873

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-メトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 368 (M + H)⁺, 248 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0874

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ベンジルオキシ)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos. 20 V) : 887 (2M + H)⁺, 444 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0875

20 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1H-イミダゾール-2-イルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 328 (M + H)⁺, 248, 164.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.79。

実施例 11-0876

25 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ナフチルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 775 (2M + H)⁺, 388 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0877

5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(4-メトキシ-1-ナフチル)メチル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 418 (M + H)⁺, 248, 171 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10 実施例 11-0878

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3, 4-ビス(ベンジルオキシ)ベン
ジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 550 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.45。

15

実施例 11-0879

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1H-ピロール-2-イルメチル)
アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 327 (M + H)⁺, 248, 193 ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 11-0880

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(チエン-2-イルメチル)アゼチジ
ン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos. 20 V) : 344 (M + H)⁺, 290, 248, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 1 1-0881

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(3-メチルチエン-2-イル)メチル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 358 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0882

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(4-プロモチエン-2-イル)メチル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos. 20 V) : 424, 422 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 1 1-0883

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(5-プロモチエン-2-イル)メチル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos. 20 V) : 424, 422 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 1 1-0884

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1H-インドール-3-イルメチル)
アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 377 (M + H)⁺, 248, 130 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 1-0885

25

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(ピリジン-4-イルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 339 (M + H)⁺, 262, 170 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 2.74。

5

実施例 11-0886

4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)フェノール

MS(ESI, Pos. 20 V): 354 (M + H)⁺, 248, 193 ;

10 HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 2.89。

実施例 11-0887

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1, 1'-ビフェニル-4-イルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 827 (2M + H)⁺, 414 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.25。

実施例 11-0888

メチル 4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)ベンゾアート

20

MS(ESI, Pos. 20 V): 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 11-0889

25

4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)安息香酸

MS (ESI, Pos. 20 V) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 1 1-0890

- 5 4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(トリフルオロメチル)ベンジル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 406 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10 実施例 1 1-0891

- 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-メチルベンジル)アゼチジン-
3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 352 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

15

実施例 1 1-0892

- 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ネオペンチルアゼチジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 318 (M + H)⁺, 290, 193 ;

- 20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 1 1-0893

- 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-2-メチルブタ-2-エニル]
アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

- 25 MS (ESI, Pos. 20 V) : 316 (M + H)⁺, 282 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0894

4-アゼパン-1-イル-N-(1-イソブチルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺, 290, 248, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.87。

実施例 11-0895

10 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2-エチルヘキシル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 719 (2M + H)⁺, 360 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0896

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2E)-3,7-ジメチルオクタ-2,6-ジエニル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 384 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

20 実施例 11-0897

4-アゼパン-1-イル-N-(1-(2E)-3-[4-(ジメチルアミノ)フェニル]プロパー-2-エニルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 407 (M + H)⁺, 276, 204 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0898

4-アゼパン-1-イル-N-(1-イソペンチルアゼチジン-3-イル)
ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 318 (M + H)⁺, 159.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-0899

4-アゼパン-1-イル-N-(1-プロピルアゼチジン-3-イル) ピリ
ミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos. 20 V) : 290 (M + H)⁺, 248, 145.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0900

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3-(メチルスルファニル) プロピル]
15 アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 336 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 11-0901

20 4-アゼパン-1-イル-N-(1-ブチルアゼチジン-3-イル) ピリミ
ジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 304 (M + H)⁺, 290, 248, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

25 実施例 11-0902

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(キノリン-2-イルメチル) アゼチ

ジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 389 (M + H)⁺, 290, 195 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

5 実施例 11-0903

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-ニトロベンジル) アゼチジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 765 (2M + H)⁺, 383 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

10

実施例 11-0904

4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] アゼチジン-1-イルメチル)-2,6-ジtert-ブチルフェノール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 931 (2M + H)⁺, 466 (M + H)⁺, 219 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.40。

実施例 11-0905

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2,3-ジヒドロ-1,4-ベンゾジオキシン-6-イルメチル) アゼチジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos. 20 V) : 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0906

25

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3-フリルメチル) アゼチジン-3-イル] ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 328 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

実施例 11-0907

5 4-アゼパン-1-イル-N-[1-(2,6-ジメトキシベンジル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 795 (2M + H)⁺, 398 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

10 実施例 11-0908

4-アゼパン-1-イル-N-(1-4-[3-(ジメチルアミノ)プロポキシ]ベンジルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 439 (M + H)⁺, 354, 220 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

15

実施例 11-0909

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2-メチル-1H-インドール-3-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 781 (2M + H)⁺, 391 (M + H)⁺, 248 ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0910

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(シクロプロピルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos. 20 V) : 302 (M + H)⁺, 290, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0911

N-1-[4-(アリルオキシ)ベンジル]アゼチジン-3-イル-4-ア
ゼパン-1-イルピリミジン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos. 20 V): 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 11-0912

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(オクチロキシ)ベンジル]アゼ
10 チジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 931 (2M + H)⁺, 466 (M + H)⁺, 248, 144 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.58。

実施例 11-0913

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(1-メチル-1H-インドール-3-
イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 781 (2M + H)⁺, 391 (M + H)⁺, 248, 144 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

20 実施例 11-0914

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1-ベンゾフラン-2-イルメチル)
アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 755 (2M + H)⁺, 378 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

25

実施例 11-0915

4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(ベンジルオキシ)ベンジル]ア
ゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 444 (M + H)⁺, 354, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

5

実施例 11-0916

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ヘプチルオキシ)ベンジル]ア
ゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 903 (2M + H)⁺, 452 (M + H)⁺, 248 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.51。

実施例 11-0917

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(1, 3-ベンゾジオキサ-4-イ
ルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 382 (M + H)⁺, 290, 248, 135 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0918

20 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(3, 5, 6-トリメチルシクロヘキサ
-3-エン-1-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-ア
ミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 767 (2M + H)⁺, 384 (M + H)⁺, 260, 130 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

25 実施例 11-0919

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(ヘキシルオキシ)-3-メトキ

シベンジル] アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 935 (2M + H)⁺, 468 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.38。

5 実施例 11-0920

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(6-クロロ-1,3-ベンゾジオキソ
ラ-5-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 418, 416 (M + H)⁺, 290, 248, 169 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

10

実施例 11-0921

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(5-エチル-2-フリル)メチル]ア
ゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 356 (M + H)⁺, 290, 248, 193 ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0922

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-tert-ブチルベンジル)ア
ゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos. 20 V) : 787 (2M + H)⁺, 394 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0923

25

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(3,7-ジメチルオクタ-6-エニ
ル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 771 (2M + H)⁺, 386 (M + H)⁺, 260, 130 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

実施例 11-0924

4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(tert-ブチルスルファニル)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 426 (M + H)⁺, 370 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0925

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(トリフルオロメトキシ)ベンジル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 843 (2M + H)⁺, 422 (M + H)⁺, 175 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

15 実施例 11-0926

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(3,5-ジメチル-1-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 432 (M + H)⁺, 216.5 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0927

4-アゼパン-1-イル-N-(1-2-[(4-クロロフェニル)スルファニル]ベンジリアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos. 20 V) : 482, 480 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

実施例 11-0928

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(3-メチル-1-ベンゾチエン-2-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 815 (2M + H)⁺, 408 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0929

10 4-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)-1-ナフトール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 404 (M + H)⁺, 290, 157 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0930

15 4-アゼパン-1-イル-N-(1-4-[2-(ジエチルアミノ)エトキシ]ベンジルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 453 (M + H)⁺, 227 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

20 実施例 11-0931

4-アゼパン-1-イル-N-(1-[(1R, 5S)-6,6-ジメチルピシクロ[3.1.1]ヘプタ-2-エン-2-イル)メチルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺, 248 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0932

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(6-メトキシ-2-ナフチル)メチル]

アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 835 (2M + H)⁺, 418 (M + H)⁺, 171 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0933

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(4-[(2E)-4-メチルペンター
2-エニル]シクロヘキサ-3-エン-1-イルメチル)アゼチジン-3-

10 イル]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 847 (2M + H)⁺, 424 (M + H)⁺, 356 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 11-0934

15 4-アゼパン-1-イル-N-1-[(5-クロロ-3-メチル-1-フェニ
ル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジ
ン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 903 (2M + H)⁺, 454, 452 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 11-0935

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2-クロロキノリン-3-イル)メチ
ル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 845 (2M + H)⁺, 425, 423 (M + H)⁺, 290 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0936

(3a' R, 5' R, 6' S, 6a' R) - 5' - [(3 - [4 - (1 - アゼ
 パニル) - 2 - ピリミジニル] アミノ - 1 - アゼチジニル) メチル] テトラ
 ヒドロスピロ [シクロヘキサン - 1, 2' - フロ [2, 3 - d] [1, 3] ジ
 オキソール] - 6' - オール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 919 (2M + H)⁺, 460 (M + H)⁺, 181 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0937

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [1 - (1, 3 - チアゾール - 2 - イルメチ
 ル) アゼチジン - 3 - イル] ピリミジン - 2 - アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 345 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.85。

実施例 11-0938

4 - アゼパン - 1 - イル - N - 1 - [(5 - エチルチエン - 2 - イル) メチル]
 アゼチジン - 3 - イルピリミジン - 2 - アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 248, 125 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-0939

2 - (3 - [(4 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 2 - イル) アミノ] アゼ
 チジン - 1 - イルメチル) キノリン - 8 - オール

MS (ESI, Pos. 20 V) : 809 (2M + H)⁺, 405 (M + H)⁺, 290, 203 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 1 1-0940

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(2-フェニル-1H-イミダゾール-4-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 404 (M + H)⁺, 290, 248, 157 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 1 1-0941

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(5-[3, 5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル]-2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos. 20 V) : 540 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.44。

実施例 1 1-0942

15 メチル 3-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)ベンゾアート

MS (ESI, Pos. 20 V) : 791 (2M + H)⁺, 396 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

20 実施例 1 1-0943

4-アゼパン-1-イル-N-1-[2-(ベンジルオキシ)エチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 382 (M + H)⁺, 292, 234 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

25

実施例 1 1-0944

4-アゼパン-1-イル-N-(1-[5-(4-クロロフェニル)-2-フリル]メチルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 440, 438 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.25。

5

実施例 11-0945

4-アゼパン-1-イル-N-1-[3-(5-メチル-2-フリル)ブチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 384 (M + H)⁺, 248, 163 ;

10 HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

実施例 11-0946

4-アゼパン-1-イル-N-(1-[5-(3-クロロフェニル)-2-フリル]メチルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

15 MS(ESI, Pos. 20 V): 875 (2M + H)⁺, 440, 438 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.25。

実施例 11-0947

20 メチル 3-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]アゼチジン-1-イルメチル)-1H-インドール-6-カルボキシラート

MS(ESI, Pos. 20 V): 869 (2M + H)⁺, 435 (M + H)⁺, 290 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

25 実施例 11-0948

4-アゼパン-1-イル-N-1-[4-(メチルスルホニル)ベンジル]

アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 831 (2M + H)⁺, 416 (M + H)⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

5 実施例 11-0949

4-アゼパン-1-イル-N-(1-[5-(2-クロロフェニル)-2-フリル]メチルアゼチジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 440, 438 (M + H)⁺, 248 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

10

実施例 11-0950

4-アゼパン-1-イル-N-1-[(3-フェニル-1H-ピラゾール-4-イル)メチル]アゼチジン-3-イルピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 807 (2M + H)⁺, 404 (M + H)⁺, 248, 202.5 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 11-0951

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(5-[2-(トリフルオロメチル)フェニル]-2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos. 20 V) : 472 (M + H)⁺, 225 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0952

25

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(5-[3-(トリフルオロメチル)フェニル]-2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-

アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 943 (2M + H)⁺, 472 (M + H)⁺, 225 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

5 実施例 11-0953

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(5-[2-クロロ-5-(トリフル
オロメチル)フェニル]-2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリ
ミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 508, 506 (M + H)⁺, 248 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.33。

実施例 11-0954

4-アゼパン-1-イル-N-[1-(5-[2-(トリフルオロメトキシ)
フェニル]-2-フリルメチル)アゼチジン-3-イル]ピリミジン-2-
15 アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 975 (2M + H)⁺, 488 (M + H)⁺, 241 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 11-0955

20 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-メチルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 401 (M + H)⁺, 276, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

25 実施例 11-0956

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピペリ

ジン-1-イルシクロヘキサノン O-エチルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 415 (M + H)⁺, 276, 208 (M + 2H)²⁺, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

5 実施例 11-0957

4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-アリルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 427 (M + H)⁺, 276, 214 (M + 2H)²⁺, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

10

実施例 11-0958

4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-(tert-ブチル) オキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 443 (M + H)⁺, 276, 194, 112 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 11-0959

4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-テトラヒドロ-2H-ピラン-2-
20 イルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 471 (M + H)⁺, 387, 276, 194 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0960

25 [(4-3- [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピ
ペリジン-1-イルシクロヘキシリデン) アミノ] オキシ酢酸

MS (ESI, Pos. 20 V) : 445 (M + H)⁺, 416, 304, 185, 171 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 11-0961

5 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-イソブチルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 443 (M + H)⁺, 276, 222 (M + 2H)²⁺, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

10 実施例 11-0962

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-[2-(トリメチルシリル) エチル]
オキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 487 (M + H)⁺, 387, 276, 230 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.40。

実施例 11-0963

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-フェニルオキシム

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 925 (2M + H)⁺, 463 (M + H)⁺, 193, 177 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 11-0964

25 4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン O-ベンジルオキシム

MS (ESI, Pos. 20 V) : 477 (M + H)⁺, 387, 239 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0965

4-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] ピペリ
ジン-1-イルシクロヘキサノン オートリチルオキシム

MS(ESI, Pos. 20 V) : 629 (M + H)⁺, 387, 243 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.60。

実施例 11-0966

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-フェ
ニル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 478 (M + H)⁺, 239.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-0967

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-ブチ
ル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 458 (M + H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

実施例 11-0968

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4
-クロロフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 514, 512 (M + H)⁺, 256.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-0969

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(3-メチルフェニル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V): 492 (M+H)⁺, 246.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

5 HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 11-0970

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(3-クロロフェニル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

10 MS(ESI, Pos.20V): 514, 512 (M+H)⁺, 256.5 (M+2H)²⁺, 193 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.16。

実施例 11-0971

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-シクロヘキシル-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

15 MS(ESI, Pos.20V): 484 (M+H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

実施例 11-0972

20 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(2-クロロフェニル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V): 514, 512 (M+H)⁺, 256.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件: A ; HPLC 保持時間 (分): 3.09。

25 実施例 11-0973

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(4

ーメチルフェニル) - 1, 4' - ビピペリジン - 1' - カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 492 (M + H)⁺, 246.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

5 実施例 11-0974

3 - [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] - N-エチ
ル-1, 4' - ビピペリジン - 1' - カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 430 (M + H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

10

実施例 11-0975

3 - [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] - N- (3,
4-ジクロロフェニル) - 1, 4' - ビピペリジン - 1' - カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M + H)⁺, 466, 273.5 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0976

3 - [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] - N- [3
- (トリフルオロメチル) フェニル] - 1, 4' - ビピペリジン - 1' - カ
20 ルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 546 (M + H)⁺, 466, 273.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 11-0977

25

3 - [(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] - N- (2
-メトキシフェニル) - 1, 4' - ビピペリジン - 1' - カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 508 (M + H)⁺, 254.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 11-0978

5 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-ヘキシル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 486 (M + H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10 実施例 11-0979

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(3-メトキシフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 508 (M + H)⁺, 254.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

15

実施例 11-0980

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4-エトキシフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 522 (M + H)⁺, 261.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0981

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4-メトキシフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

25 MS (ESI, Pos.20V) : 508 (M + H)⁺, 254.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0982

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(1-ナフチル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

5 MS(ESI, Pos.20V) : 528 (M+H)⁺, 264.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 11-0983

10 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(2-エトキシフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 522 (M+H)⁺, 261.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-0984

15 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-[2-(トリフルオロメチル) フェニル] -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 546 (M+H)⁺, 253.5 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20

実施例 11-0985

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(2, 4-ジクロロフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M+H)⁺, 465, 273.5 (M+2H)²⁺, 193 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.17。

実施例 11-0986

エチル N-〔(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ〕-1, 4'-ビピペリジン-1'-イルカルボニル) グリシナート

MS (ESI, Pos.20V) : 488 (M + H)⁺, 221, 193 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-0987

3-〔(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ〕-N-(2-メチルフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

10 MS (ESI, Pos.20V) : 492 (M + H)⁺, 246.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0988

3-〔(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ〕-N-(2-フルオロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

15 MS (ESI, Pos.20V) : 496 (M + H)⁺, 248.5 (M + 2H)²⁺, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-0989

20 3-〔(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ〕-N-(3-フルオロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 991 (2M + H)⁺, 496 (M + H)⁺, 248.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

25 実施例 11-0990

3-〔(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ〕-N-(2,

4-ジフルオロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 514 (M + H)⁺, 257.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5

実施例 11-0991

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4-イソプロピルフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

10 MS (ESI, Pos.20V) : 520 (M + H)⁺, 260.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0992

15 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(2-エチルフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M + H)⁺, 253.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0993

20 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-ベンジル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 492 (M + H)⁺, 372, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

25 実施例 11-0994

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4

－フルオロフェニル)－1, 4'－ピペリジン－1'－カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 496 (M + H)⁺, 248.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5 実施例 11-0995

3－[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]－N－[4－(トリフルオロメチル) フェニル]－1, 4'－ピペリジン－1'－カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 546 (M + H)⁺, 466, 273.5 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 11-0996

3－[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]－N－(2, 5-ジメチルフェニル)－1, 4'－ピペリジン－1'－カルボキサミド

15 MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M + H)⁺, 253.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-0997

20 3－[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]－N－[3－(メチルスルファニル) フェニル]－1, 4'－ピペリジン－1'－カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 524 (M + H)⁺, 262.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

25 実施例 11-0998

N－(1-アダマンチル)－3－[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2

−イル) アミノ] − 1, 4′ −ピペリジン− 1′ −カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 536 (M + H)⁺, 461, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

5 実施例 11-0999

3 − [(4 −アゼパン− 1 −イルピリミジン− 2 −イル) アミノ] − N − (2, 4 −ジメトキシフェニル) − 1, 4′ −ピペリジン− 1′ −カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 538 (M + H)⁺, 269.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-1000

3 − [(4 −アゼパン− 1 −イルピリミジン− 2 −イル) アミノ] − N − (3, 5 −ジメチルフェニル) − 1, 4′ −ピペリジン− 1′ −カルボキサミド

15 MS(ESI, Pos.20V) : 506 (M + H)⁺, 446, 253.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-1001

20 N − (3 −アセチルフェニル) − 3 − [(4 −アゼパン− 1 −イルピリミジン− 2 −イル) アミノ] − 1, 4′ −ピペリジン− 1′ −カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 520 (M + H)⁺, 372, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-1002

25 3 − [(4 −アゼパン− 1 −イルピリミジン− 2 −イル) アミノ] − N − (3, 5 −ジクロロフェニル) − 1, 4′ −ピペリジン− 1′ −カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M + H)⁺, 466, 273.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-1003

5 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(2,
5-ジクロロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M + H)⁺, 466, 273.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.15。

10 実施例 11-1004

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-ペン
チル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 472 (M + H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

15

実施例 11-1005

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(1,
1'-ビフェニル-2-イル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキ
サミド

20 MS (ESI, Pos.20V) : 554 (M + H)⁺, 496, 277.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-1006

25 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N-(2,
6-ジクロロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M + H)⁺, 273.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-1007

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2,
5-フェニルエチル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M+H)⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 11-1008

10 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2,
4-ジメチルフェニル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M+H)⁺, 253.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

15 実施例 11-1009

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2,
3-ジクロロフェニル)-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 548, 546 (M+H)⁺, 273.5 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

20

実施例 11-1010

N-(4-アセチルフェニル)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン
-2-イル) アミノ]-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 520 (M+H)⁺, 372, 193 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 11-1011

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(3-シアノフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 503 (M+H)⁺, 252 (M+2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 11-1012

エチル 4-[(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-1, 4'-ビピペリジン-1'-イルカルボニル) アミノ] ベンゾ
10 アート

MS (ESI, Pos.20V) : 550 (M+H)⁺, 472, 275.5 (M+2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-1013

15 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-[4-(メチルスルファニル) フェニル]-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 524 (M+H)⁺, 262.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

20

実施例 11-1014

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2, 3-ジメチルフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M+H)⁺, 253.5 (M+2H)²⁺, 180 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-1015

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(4-フェノキシフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド
MS (ESI, Pos.20V) : 570 (M + H)⁺, 478, 285.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 11-1016

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ] -N-(3-エチルフェニル) -1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

10 MS (ESI, Pos.20V) : 506 (M + H)⁺, 253.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

実施例 11-1017

エチル N-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミ
15 ノ] -1, 4'-ビピペリジン-1'-イルカルボニル) メチオニナート

MS (ESI, Pos.20V) : 562 (M + H)⁺, 281.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 11-1018

20 エチル N-(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミ
ノ] -1, 4'-ビピペリジン-1'-イルカルボニル) フェニルアラニナ
ート

MS (ESI, Pos.20V) : 578 (M + H)⁺, 496, 289.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

25

実施例 11-1019

エチル 3-[(3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-1, 4'-ビピペリジン-1'-イルカルボニル) アミノ] ベンゾ
アート

MS(ESI, Pos.20V) : 550 (M + H)⁺, 275.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-1020

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2-イソプロピルフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミ
10 ド

MS(ESI, Pos.20V) : 520 (M + H)⁺, 260.5 (M + 2H)²⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-1021

15 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-[(1R)-1-フェニルエチル]-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 506 (M + H)⁺, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

20 実施例 11-1022

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-[(1R, 2S)-2-フェニルシクロプロピル]-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

25 MS(ESI, Pos.20V) : 518 (M + H)⁺, 259.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 11-1023

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-イソ
プロピル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

5 MS(ESI, Pos.20V) : 444 (M+H)⁺, 276, 180 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

実施例 11-1024

10 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-(2,
6-ジフルオロフェニル)-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミ
ド

MS(ESI, Pos.20V) : 514 (M+H)⁺, 372, 193 ;

HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

15

実施例 11-1025

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N, N-
ジメチル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V) : 430 (M+H)⁺, 372, 193 ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 11-1026

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(モルホリ
ン-4-イルカルボニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

25 MS(ESI, Pos.20V) : 472 (M+H)⁺, 372, 114 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 11-1027

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N, N-ジエチル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

5 MS (ESI, Pos.20V) : 458 (M + H)⁺, 372, 193 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

実施例 11-1028

10 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N, N-ジイソプロピル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 486 (M + H)⁺, 359, 128 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 11-1029

15 3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N-メチル-N-フェニル-1, 4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 492 (M + H)⁺, 359, 134 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

20 実施例 11-1030

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(10H-フェノチアジン-10-イルカルボニル)-1, 4'-ビピペリジン-3-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 584 (M + H)⁺, 359, 292.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

実施例 11-1031

N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(9H-カルバゾール-9-イルカルボニル)-1, 4'-ビペリジン-3-アミン
MS(ESI, Pos.20V): 552 (M+H)⁺, 468, 276.5 (M+2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.31。

実施例 11-1032

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) アミノ]-N, N-ジフェニル-1, 4'-ビペリジン-1'-カルボキサミド

10 MS(ESI, Pos.20V): 554 (M+H)⁺, 470, 359, 196;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.23。

実施例 11-1033

15 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(ピロリジン-1-イルカルボニル)-1, 4'-ビペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 456 (M+H)⁺, 372, 359;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.98。

実施例 11-1034

20 N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-[(4-メチルピペラジン-1-イル) カルボニル]-1, 4'-ビペリジン-3-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 485 (M+H)⁺, 227;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.83。

25

実施例 11-1035

3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]-N,N-ジブチル-1,4'-ビピペリジン-1'-カルボキサミド

MS(ESI, Pos.20V): 514 (M+H)⁺, 450, 359, 156;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.29。

5

実施例 12-1 ~ 実施例 12-6

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

10 実施例 12-1

N¹-[2-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)ピリミジン-4-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1,2-ジアミン

NMR(CD₃OD): δ 2.72 (s, 6H), 2.90 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.13 (t, J = 6.30 Hz, 2H), 3.74 (t, J = 6.30 Hz, 2H), 3.94 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 4.81 (s, 2H), 5.90 (d, J = 6.00 Hz, 1H), 7.17 (m, 4H), 7.75 (d, J = 6.00 Hz, 1H);

15

MS(ESI, Pos. 20 V): 298 (M+H)⁺, 224, 186;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.85;

TLC: R_f 0.53 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

20 実施例 12-2

1-(4-[2-(ジメチルアミノ)エチル]アミノピリミジン-2-イル)ピペリジン-3-オール

実施例 12-3

25 N¹-[2-(2,3-ジヒドロ-1H-インドール-1-イル)ピリミジン-4-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1,2-ジアミン

M S (ESI, Pos, 20 V) : 284 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.53。

実施例 1 2 - 4

5 N¹-[2-アゼパン-1-イル-5-(トリフルオロメチル)ピリミジン-4-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.47 (m, 4H), 1.76 (m, 4H), 2.15 (s, 6H), 2.37 (t, J = 7.00 Hz, 2H), 3.31 (m, 2H), 3.59 (m, 4H), 7.17 (m, 1H), 8.12 (s, 1H) ;

M S (ESI, Pos, 20 V) : 332 (M + H)⁺ ;

10 T L C : R f 0.49 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 2 - 5

N¹-[2-アゼパン-1-イル-5-(4-メチルフェニル)ピリミジン-4-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

15 NMR(DMSO-d₆): δ 1.48 (m, 4H), 1.70 (m, 4H), 2.13 (s, 6H), 2.32 (s, 3H), 2.38 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.38 (dt, J = 5.4, 6.8 Hz, 2H), 3.69 (t, J = 6.3 Hz, 4H), 6.02 (t, J = 5.40 Hz, 1H), 7.20 (m, 4H), 7.61 (s, 1H) ;

M S (ESI, Pos, 20 V) : 354 (M + H)⁺, 177.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.51 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

20

実施例 1 2 - 6

N¹-[2-アゼパン-1-イル-5-(4-メトキシフェニル)ピリミジン-4-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.48 (m, 4H), 1.71 (m, 4H), 2.13 (s, 6H), 2.38 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.37 (dt, J = 5.3, 6.8 Hz, 2H), 3.68 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 3.76 (s, 3H), 5.98 (t, J = 5.30 Hz, 1H), 6.98 (d, J = 8.80 Hz, 2H), 7.23 (d, J = 8.80 Hz, 2H), 7.59 (s, 1H) ;

M S (ESI, Pos, 20 V) : 370 (M + H)⁺, 185.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.61 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 0 1 ~ 実施例 1 3 - 1 2 1

5 相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、
以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 1 3 - 0 0 1

10 4 - (3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 2 (1 H) - イル) - N - [(1 S*,
2 S*) - 2 - モルホリン - 4 - イルシクロヘキシル] キナゾリン - 2 - アミ
ン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.24 (m, 4H), 1.72 (m, 3H), 2.32 (m, 3H), 2.62 (m, 2H), 3.05
(m, 2H), 3.22 (m, 2H), 3.32 (m, 3H), 3.84 (m, 3H), 4.75 (s, 2H), 6.28 (d, J = 6.60 Hz,
1H), 7.06 (m, 1H), 7.19 (m, 4H), 7.31 (d, J = 8.50 Hz, 1H), 7.50 (m, 1H), 7.81 (d, J =
15 7.40 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 887 (2M + H)⁺, 444 (M + H)⁺, 222.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.34 (AcOEt : MeOH = 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 0 2

20 4 - (3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 2 (1 H) - イル) - N - [(1 S*,
2 S*) - 2 - (4 - メチルピペラジン - 1 - イル) シクロヘキシル] キナゾ
リン - 2 - アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.19 (m, 4H), 1.71 (m, 3H), 1.97 (s, 3H), 2.17 (m, 4H), 2.37
(m, 3H), 2.61 (m, 2H), 3.06 (t, J = 5.20 Hz, 2H), 3.37 (m, 1H), 3.81 (m, 3H), 4.75 (s,
25 2H), 6.19 (d, J = 6.60 Hz, 1H), 7.08 (m, 1H), 7.18 (m, 4H), 7.32 (d, J = 8.00 Hz, 1H),
7.50 (m, 1H), 7.80 (d, J = 8.00 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 913 (2M + H)⁺, 457 (M + H)⁺, 229 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.57 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 0 3

5 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-ベンジルピロリジン-3-イル]
キナゾリン-2-アミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.64 (m, 5H), 1.92 (m, 4H), 2.35 (m, 1H), 2.52 (m, 2H), 2.72 (m,
1H), 2.91 (dd, J = 9.40, 6.90 Hz, 1H), 3.63 (s, 2H), 3.86 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.62 (m,
1H), 5.31 (m, 1H), 6.99 (m, 1H), 7.28 (m, 5H), 7.45 (m, 2H), 7.80 (d, J = 8.20 Hz,
10 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 402 (M + H)⁺, 312 ;

T L C : R f 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 0 4

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-ベンジルピロリジン-3-イル]
キナゾリン-2-アミン

N M R (CDCl₃) : δ 1.64 (m, 5H), 1.92 (m, 4H), 2.35 (m, 1H), 2.52 (m, 2H), 2.72 (m,
1H), 2.91 (dd, J = 9.50, 7.00 Hz, 1H), 3.63 (s, 2H), 3.86 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.62 (m,
1H), 5.35 (m, 1H), 7.00 (m, 1H), 7.28 (m, 5H), 7.45 (m, 2H), 7.80 (d, J = 8.10 Hz,
20 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 402 (M + H)⁺, 312 ;

T L C : R f 0.55 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 0 5

25 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
ピロリジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.54 (m, 4H), 1.74 (m, 6H), 2.18 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.71 (m, 1H), 2.93 (m, 1H), 3.73 (s, 2H), 3.84 (m, 4H), 4.40 (m, 1H), 6.70 (m, 1H), 6.98 (t, $J = 7.70$ Hz, 1 H) 7.25 (m, 2H), 7.46 (m, 2H), 7.74 (t, $J = 7.50$ Hz, 1H), 7.83 (d, $J = 8.80$ Hz, 1H), 8.47 (d, $J = 4.40$ Hz, 1H) ;

5 MS (ESI, Pos, 20 V) : 403 (M + H)⁺, 202 (M + 2H)⁺ ;

TLC : Rf 0.33 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 13-006

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピロリ
10 ジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 0.86 (t, $J = 7.00$ Hz, 6H), 1.33 (m, 6H), 1.66 (m, 4H), 1.81 (m, 1H), 1.97 (m, 4H), 2.31 (m, 4H), 2.61 (m, 2H), 3.02 (m, 1H), 3.93 (t, $J = 5.50$ Hz, 4H), 4.53 (m, 1H), 7.06 (m, 1H), 7.52 (m, 2H), 7.80 (d, $J = 8.40$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 396 (M + H)⁺, 312 ;

15 TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 13-007

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピロリジン-3-
20 イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 0.91 (d, $J = 6.60$ Hz, 6H), 1.66 (m, 6H), 1.94 (m, 4H), 2.22 (dd, $J = 7.50, 3.10$ Hz, 2H), 2.31 (m, 1H), 2.47 (m, 2H), 2.69 (m, 1H), 2.84 (dd, $J = 9.50, 7.00$ Hz, 1 H) 3.87 (t, $J = 5.90$ Hz, 4H), 4.60 (m, 1H), 5.39 (m, 1H), 6.99 (m, 1H), 7.44 (m, 2H), 7.81 (d, $J = 8.80$ Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 368 (M + H)⁺ ;

25 TLC : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 13-008

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(シクロヘキシルメチル)ピロリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 0.88 (m, 2H), 1.18 (m, 2H), 1.26 (m, 2H), 1.45 (m, 1H), 1.67 (m, 6H), 1.78 (m, 4H), 1.96 (m, 4H), 2.28 (m, 3H), 2.41 (m, 1H), 2.61 (m, 2H), 2.99 (m, 1H), 3.92 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.56 (m, 1H), 7.05 (m, 1H), 7.49 (m, 2H), 7.80 (d, J = 8.40 Hz, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 408 (M + H)⁺, 204.5 (M + 2H)⁺;

TL C: R_f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

10

実施例 13-009

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)ピロリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.64 (m, 4H), 1.75 (m, 1H), 1.93 (m, 4H), 2.38 (m, 1H), 2.60 (m, 2H), 2.82 (m, 1H), 2.97 (dd, J = 9.90, 7.00 Hz, 1H), 3.76 (d, J = 13.60 Hz, 1H), 3.83 (d, J = 13.60 Hz, 1H), 3.87 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.65 (m, 1H), 5.59 (m, 1H), 7.00 (m, 1H), 7.15 (dd, J = 5.10, 1.10 Hz, 1H), 7.45 (m, 3H), 7.65 (td, J = 7.60, 1.80 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 8.40 Hz, 1H), 8.55 (ddd, J = 5.10, 1.80, 0.70 Hz, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 403 (M + H)⁺, 202 (M + 2H)⁺;

TL C: R_f 0.35 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

20

実施例 13-010

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピロリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 0.86 (t, J = 6.20 Hz, 6H), 1.36 (m, 6H), 1.66 (m, 5H), 1.95 (m, 4H), 2.29 (m, 2H), 2.45 (m, 2H), 2.67 (m, 1H), 2.84 (m, 1H), 3.89 (t, J = 5.50 Hz,

25

4H), 4.59 (m, 1H), 5.68 (m, 1H), 7.01 (m, 1H), 7.46 (m, 2H), 7.81 (d, J = 8.40 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 396 (M + H)⁺, 312, 243 ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

5

実施例 1 3 - 0 1 1

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - イソブチルピロリジン - 3 - イル] キナゾリン - 2 - アミン

10 N M R (CDCl₃) : δ 0.92 (d, J = 6.60 Hz, 6H), 1.66 (m, 6H), 1.95 (m, 4H), 2.23 (dd, J = 7.70, 2.90 Hz, 2H), 2.31 (m, 1H), 2.48 (m, 2H), 2.67 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.90 (t, J = 5.50 Hz, 4H), 4.59 (m, 1H), 5.93 (m, 1H), 7.03 (m, 1H), 7.47 (m, 2H), 7.81 (d, J = 8.10 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 368 (M + H)⁺, 184.5 (M + 2H)⁺ ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

15

実施例 1 3 - 0 1 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (シクロヘキシルメチル) ピロリジン - 3 - イル] キナゾリン - 2 - アミン

20 N M R (CDCl₃) : δ 0.89 (m, 2H), 1.20 (m, 4H), 1.45 (m, 1H), 1.67 (m, 6H), 1.78 (m, 3H), 1.96 (m, 4H), 2.29 (dd, J = 7.30, 2.90 Hz, 2H), 2.36 (m, 1H), 2.40 (m, 1H), 2.62 (m, 2H), 2.99 (m, 1H), 3.92 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.57 (m, 1H), 7.07 (m, 1H), 7.50 (m, 2H), 7.81 (d, J = 8.10 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 408 (M + H)⁺, 312, 243 ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

25

実施例 1 3 - 0 1 3

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.16 (m, 6H), 1.56 (m, 4H), 1.65 (m, 3H), 1.85 (m, 7H), 2.05 (m, 2H), 2.39 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.91 (t, J = 8.40 Hz, 1H), 3.81 (t, J = 5.30 Hz, 4H), 4.33 (m, 1H), 6.62 (m, 1H), 6.97 (t, J = 8.10 Hz, 1H), 7.25 (d, J = 8.10 Hz, 1H), 7.44 (t, J = 8.10 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 8.10 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 394 (M + H)⁺, 312, 197.5 (M + 2H)²⁺ ;

TL C : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

10 実施例 13-014

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.16 (m, 6H), 1.56 (m, 4H), 1.66 (m, 3H), 1.86 (m, 7H), 2.05 (m, 2H), 2.39 (m, 1H), 2.59 (m, 1H), 2.90 (t, J = 8.10 Hz, 1H), 3.81 (t, J = 5.50 Hz, 4H), 4.33 (m, 1H), 6.57 (m, 1H), 6.97 (t, J = 8.20 Hz, 1H), 7.25 (d, J = 8.20 Hz, 1H), 7.44 (t, J = 8.20 Hz, 1H), 7.82 (d, J = 8.20 Hz, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 394 (M + H)⁺, 312, 197.5 (M + 2H)²⁺ ;

TL C : Rf 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

20 実施例 13-015

N¹, N¹-ジメチル-N²-(4-ピペリジン-1-イルキナゾリン-2-イル)エタン-1, 2-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V) : 300 (M + H)⁺, 157 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.04。

25

実施例 13-016

4-ピペリジン-1-イル-N-(2-ピロリジン-1-イルエチル)キナ
ゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 326 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.94。

5

実施例 13-017

4-ピペリジン-1-イル-N-(2-ピペリジン-1-イルエチル)キナ
ゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 340 (M + H)⁺, 170.5 (M + 2H)²⁺ ;

10

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 13-018

N-ベンジル-4-ピペリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 637 (2M + H)⁺, 319 (M + H)⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.55。

実施例 13-019

N-(2-フェニルエチル)-4-ピペリジン-1-イルキナゾリン-2-
アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 333 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.64。

実施例 13-020

N-イソベンチル-4-ピペリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 597 (2M + H)⁺, 299 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.67。

実施例 13-021

4-ピペリジン-1-イル-N-(チエン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V) : 325 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.62。

実施例 13-022

10 N-(2-フリルメチル)-4-ピペリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 309 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 13-023

15 4-ピペリジン-1-イル-N-(ピリジン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 320 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

20 実施例 13-024

4-ピペリジン-1-イル-N-(2-ピリジン-2-イルエチル)キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 334 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

25

実施例 13-025

N-[(5-メチルピラジン-2-イル)メチル]-4-ピペリジン-1-イル
キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 669 (2M + H)⁺, 335 (M + H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.14。

5

実施例 13-026

4-アゼパン-1-イル-N-(2-ピペリジン-1-イルエチル)キナゾ
リン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 354 (M + H)⁺;

10 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 13-027

N¹-(4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-イル)-N³, N³-ジメチ
ルプロパン-1, 3-ジアミン

15 MS(ESI, Pos.20V): 328 (M + H)⁺, 157;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.01。

実施例 13-028

4-アゼパン-1-イル-N-ベンジルキナゾリン-2-アミン

20 MS(ESI, Pos.20V): 665 (2M + H)⁺, 333 (M + H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.64。

実施例 13-029

4-アゼパン-1-イル-N-(2-フェニルエチル)キナゾリン-2-ア
25 ミン

MS(ESI, Pos.20V): 693 (2M + H)⁺, 347 (M + H)⁺;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.71。

実施例 13-030

4-アゼパン-1-イル-N-イソペンチルキナゾリン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 313 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.73。

実施例 13-031

4-アゼパン-1-イル-N-(チエン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 339 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.58。

実施例 13-032

15 4-アゼパン-1-イル-N-(2-フリルメチル)キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 323 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.49。

20 実施例 13-033

4-アゼパン-1-イル-N-(ピリジン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 334 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

25

実施例 13-034

4-アゼパン-1-イル-N-(2-ピリジン-2-イルエチル)キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 348 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.00。

5

実施例 13-035

4-アゼパン-1-イル-N-[(5-メチルピラジン-2-イル)メチル]キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 349 (M + H)⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 13-036

N-ベンジル-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 609 (2M + H)⁺, 305 (M + H)⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.43。

実施例 13-037

N-(2-フェニルエチル)-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 319 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.55。

実施例 13-038

N-イソペンチル-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 569 (2M + H)⁺, 285 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.58。

実施例 13-039

4-ピロリジン-1-イル-N-(チエン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 621 (2M + H)⁺, 311 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

実施例 13-040

10 N-(2-フリルメチル)-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 589 (2M + H)⁺, 295 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

実施例 13-041

15 N-(ピリジン-2-イルメチル)-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 306 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

20 実施例 13-042

N-(2-ピリジン-2-イルエチル)-4-ピロリジン-1-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 320 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

25

実施例 13-043

N-[(5-メチルピラジン-2-イル)メチル]-4-ピロリジン-1-イル
キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 321 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.04。

5

実施例 1 3-0 4 4

4-アゾカン-1-イル-N-ベンジルキナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 693 (2M + H)⁺, 347 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.71。

10

実施例 1 3-0 4 5

4-アゾカン-1-イル-N-(2-フェニルエチル)キナゾリン-2-ア
ミン

MS(ESI, Pos.20V) : 721 (2M + H)⁺, 361 (M + H)⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.78。

実施例 1 3-0 4 6

4-アゾカン-1-イル-N-イソペンチルキナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 653 (2M + H)⁺, 327 (M + H)⁺ ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.86。

実施例 1 3-0 4 7

4-アゾカン-1-イル-N-(チエン-2-イルメチル)キナゾリン-2
-アミン

25

MS(ESI, Pos.20V) : 353 (M + H)⁺, 257

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.69。

実施例 13-048

4-アゾカン-1-イル-N-(2-フリルメチル)キナゾリン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 337 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.60。

実施例 13-049

10 4-アゾカン-1-イル-N-(ピリジン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 348 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

実施例 13-050

15 4-アゾカン-1-イル-N-(2-ピリジン-2-イルエチル)キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 723 (2M + H)⁺, 362 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

20 実施例 13-051

4-アゾカン-1-イル-N-[(5-メチルピラジン-2-イル)メチル]
キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 725 (2M + H)⁺, 363 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

25

実施例 13-052

4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N-ベンジルキ
ナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 717 (2M + H)⁺, 359 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.75。

5

実施例 13-053

4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N- (2-フェ
ニルエチル) キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 745 (2M + H)⁺, 373 (M + H)⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.84。

実施例 13-054

4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N-イソペンチ
ルキナゾリン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 339 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.88。

実施例 13-055

20 4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N- (ピリジン
-2-イルメチル) キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 360 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.01。

実施例 13-056

25 4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N- (2-ピリ
ジン-2-イルエチル) キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 13-057

5 4- (3-アザビシクロ [3. 2. 2] ノナ-3-イル) -N- [(5-メチルピラジン-2-イル) メチル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 749 (2M + H)⁺, 375 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.31。

10 実施例 13-058

2, 2' - [(2- [4- (3, 4-ジヒドロ-2 (1H) -イソキノリニル) -2-キナゾリニル] アミノエチル) イミノ] ジエタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 815 (2M + H)⁺, 408 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

15

実施例 13-059

4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) -N- [3- (1H-イミダゾール-1-イル) プロピル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 769 (2M + H)⁺, 385 (M + H)⁺ ;

20

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.06。

実施例 13-060

4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) -N- (2-モルホリン-4-イルエチル) キナゾリン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 779 (2M + H)⁺, 390 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

実施例 13-061

4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) -N- (3-ピロリジン-1-イルプロピル) キナゾリン-2-アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 13-062

10 4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) -N- [2- (1-メチルピロリジン-2-イル) エチル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-063

15 4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) -N- [(1-エチルピロリジン-2-イル) メチル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 775 (2M + H)⁺, 388 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

20 実施例 13-064

N¹- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) キナゾリン-2-イル] -N³, N³, 2, 2-テトラメチルプロパン-1, 3-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 779 (2M + H)⁺, 390 (M + H)⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 13-065

N^1 - [4 - (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) キナゾリン-2 -イル] - N^2 , N^2 -ジメチルプロパン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-066

N^1 - [4 - (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) キナゾリン-2 -イル] - N^2 , N^2 -ジエチルエタン-1, 2-ジアミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 376 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-067

15 N^1 - [4 - (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) キナゾリン-2 -イル] - N^3 , N^3 -ジエチルプロパン-1, 3-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 390 (M + H)⁺, 195.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 13-068

20 4 - (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) - N - (3-モルホリン-4-イルプロピル) キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 404 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

25 実施例 13-069

2, 2' - [(3 - [4 - (3, 4-ジヒドロ-2 (1H) -イソキノリニル)

ー2-キナゾリニル] アミノプロピル) イミノ] ジエタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 422 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03。

5 実施例 13-070

N¹-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) キナゾリ
ン-2-イル] -N³, N³-ジメチルプロパン-1,3-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

10

実施例 13-071

N²-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) キナゾリ
ン-2-イル] -N¹, N¹-ジメチルプロパン-1,2-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 362 (M + H)⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 13-072

4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) -N-[3-(2-
メチルピペリジン-1-イル) プロピル] キナゾリン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 416 (M + H)⁺, 208.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 13-073

4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル) -N-[(1-メ
チルピロリジン-2-イル) メチル] キナゾリン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 374 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-074

5 N-ベンジル-4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)
キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 733 (2M + H)⁺, 367 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.62。

実施例 13-075

10 4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-(2-フ
エニルエチル)キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 761 (2M + H)⁺, 381 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.69。

15 実施例 13-076

4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-イソベン
チルキナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 693 (2M + H)⁺, 347 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.75。

20

実施例 13-077

4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-(チエン
-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

25 実施例 13-078 4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-
イル)-N-(2-フリルメチル)キナゾリン-2-アミン

実施例 13-079

4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-(ピリジン-2-イルメチル)キナゾリン-2-アミン

5 MS(ESI, Pos.20V): 368 (M+H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.03。

実施例 13-080

10 4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-(2-ピリジン-2-イルエチル)キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 382 (M+H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.05。

実施例 13-081

15 4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)-N-[(5-メチルピラジン-2-イル)メチル]キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 765 (2M+H)⁺, 383 (M+H)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.29。

20 実施例 13-082

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルアゼパン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

25 NMR(DMSO-d₆): δ 1.57 (m, 9H), 1.86 (m, 5H), 2.59 (m, 3H), 2.84 (dd, J = 13.20, 4.00 Hz, 1H), 3.65 (s, 2H), 3.79 (m, 4H), 4.08 (m, 1H), 6.20 (m, 1H), 6.96 (m, 1H), 7.26 (m, 6H), 7.42 (m, 1H), 7.79 (d, J = 8.40 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 430 (M+H)⁺, 290, 193;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20 ;

T L C : R f 0.40 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 3 - 0 8 3

5 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - ベンジルアゼパン - 3 - イル]
キナゾリン - 2 - アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.48 (m, 8H), 1.82 (m, 4H), 2.61 (m, 3H), 2.84 (dd, J =
13.00, 3.80 Hz, 1H), 3.16 (d, J = 5.30 Hz, 2H), 3.65 (s, 2H), 3.78 (m, 4H), 4.06 (m,
1H), 6.19 (m, 1H), 6.95 (t, J = 7.70 Hz, 1H), 7.23 (m, 6H), 7.42 (m, 1H), 7.79 (d, J =
10 8.20 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 430 (M + H)⁺, 340 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18 ;

T L C : R f 0.40 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

15 実施例 1 3 - 0 8 4

N - [(3 S) - アゼパン - 3 - イル] - 4 - アゼパン - 1 - イルキナゾリン
- 2 - アミン

N M R (DMSO-d₆) : δ 1.51 (m, 10H), 1.84 (m, 5H), 2.63 (dd, J = 13.50, 7.20 Hz,
1H), 2.74 (t, J = 5.80 Hz, 1H), 2.94 (dd, J = 13.50, 4.10 Hz, 1H), 3.80 (m, 4H), 4.04
20 (m, 1H), 6.21 (m, 1H), 6.95 (t, J = 7.60 Hz, 1H), 7.23 (d, J = 8.20 Hz, 1H), 7.43 (t, J
= 7.60 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 8.20 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 340 (M + H)⁺, 170.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07 ;

T L C : R f 0.22 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

25

実施例 1 3 - 0 8 5

N-[(3R)-アゼパン-3-イル]-4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.57 (m, 10H), 1.84 (m, 5H), 2.63 (dd, J = 13.60, 7.10 Hz, 1H), 2.74 (t, J = 6.00 Hz, 1H), 2.93 (dd, J = 13.60, 4.40 Hz, 1H), 3.80 (m, 4H), 4.04 (m, 1H), 6.23 (m, 1H), 6.95 (t, J = 7.10 Hz, 1H), 7.23 (d, J = 8.10 Hz, 1H), 7.43 (m, 1H), 7.80 (d, J = 8.10 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 340 (M + H)⁺, 170.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.07;

TLC: Rf 0.24 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10

実施例 13-086

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

15

実施例 13-087

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

実施例 13-088

20

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)アゼパン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 424 (M + H)⁺, 340, 212.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.31。

25

実施例 13-089

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)アゼパ

ン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 424 (M + H)⁺, 340, 212.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

5 実施例 13-090

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルアゼパン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 396 (M + H)⁺, 340, 198.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

10

実施例 13-091

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルアゼパン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 396 (M + H)⁺, 340, 198.5 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 13-092

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルアゼパン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos. 20 V) : 422 (M + H)⁺, 396, 340, 211.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 13-093

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルアゼパン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos. 20 V) : 422 (M + H)⁺, 396, 340, 211.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 13-094

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルピペリジン-3-イ
5 ル] キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 831 (2M + H)⁺, 416 (M + H)⁺, 326 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 13-095

10 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルピペリジン-3-イ
ル] キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 831 (2M + H)⁺, 416 (M + H)⁺, 326 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

15 実施例 13-096

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-ベンジルピペリジン-3-イ
ル] キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 417 (M + H)⁺, 209 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

20

実施例 13-097

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
ピペリジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V) : 417 (M + H)⁺, 209 (M + 2H)²⁺ ;

25

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-098

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 819 (2M + H)⁺, 410 (M + H)⁺, 326, 205.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 13-099

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 819 (2M + H)⁺, 410 (M + H)⁺, 326, 205.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 13-100

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 763 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺, 191.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

実施例 13-101

20 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 764 (2M + H)⁺, 382 (M + H)⁺, 191.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.12。

25 実施例 13-102

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピペリジン-

3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 815 (2M + H)⁺, 408 (M + H)⁺, 326, 204.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

5 実施例 13-103

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 815 (2M + H)⁺, 408 (M + H)⁺, 326, 204.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10

実施例 13-104

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-ピペリジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

15

NMR(CDCl₃): δ 1.54 (m, 2H), 1.65 (m, 4H), 1.78 (m, 1H), 1.95 (m, 5H), 2.18 (m, 1H), 2.58 (dd, J = 11.80, 8.20 Hz, 1H), 2.67 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 3.28 (dd, J = 11.80, 3.40 Hz, 1H), 3.87 (t, J = 5.70 Hz, 4H), 4.00 (m, 1H), 5.27 (m, 1H), 7.00 (m, 1H), 7.45 (m, 2H), 7.81 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 326 (M + H)⁺, 163.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : R_f 0.17 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

20

実施例 13-105

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-ピペリジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

25

NMR(DMSO-d₆): δ 1.41 (m, 2H), 1.59 (m, 5H), 1.85 (m, 5H), 2.37 (m, 2H), 2.76 (m, 1H), 3.01 (dd, J = 11.40, 3.50 Hz, 1H), 3.80 (m, 5H), 6.27 (m, 1H), 6.96 (t, J = 7.60 Hz, 1H), 7.24 (d, J = 8.20 Hz, 1H), 7.43 (t, J = 7.60 Hz, 1H), 7.80 (d, J = 8.20

Hz, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 326 (M + H)⁺, 163.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.17 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

5 実施例 13-106

4-アゼパン-1-イル-N- (1-ベンジルアゼチジン-3-イル) キナ
ゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 388 (M + H)⁺, 298 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18。

10

実施例 13-107

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (ピリジン-2-イルメチル) アゼチ
ジン-3-イル] キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 389 (M + H)⁺, 195 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-108

4-アゼパン-1-イル-N- [1- (2-エチルブチル) アゼチジン-3
-イル] キナゾリン-2-アミン

20

MS (ESI, Pos.20V) : 382 (M + H)⁺, 298, 191.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 13-109

4-アゼパン-1-イル-N- (1-イソブチルアゼチジン-3-イル) キ
ナゾリン-2-アミン

25

MS (ESI, Pos.20V) : 354 (M + H)⁺, 298, 177.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.09。

実施例 13-110

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘキシルアゼチジン-3-イル)

5 キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20V) : 380 (M + H)⁺, 298, 190.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 13-111

10 4-アゼパン-1-イル-N-アゼチジン-3-イルキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20V) : 298 (M + H)⁺, 149.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.89。

15 実施例 13-112

2, 4-ジピペリジン-1-イルキナゾリン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 297 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

20 実施例 13-113

N¹-(4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-イル)-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 314 (M + H)⁺, 157.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

25

実施例 13-114

2, 4-ジアゼパン-1-イルキナゾリン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 325 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.62。

5 実施例 13-115

N¹-[4-(3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H)-イル) キナゾリン-2-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 348 (M + H)⁺, 174.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

10

実施例 13-116

4-(3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H)-イル)-N-(2-ピロリジン-1-イルエチル) キナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 374 (M + H)⁺, 187.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.07。

実施例 13-117

4-(3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H)-イル)-N-(2-ペリジン-1-イルエチル) キナゾリン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 388 (M + H)⁺, 194.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.60。

実施例 13-118

4-アゼパン-1-イル-N-イソペンチルキナゾリン-2-アミン

25 MS (ESI, Pos. 20 V) : 625 (2M + H)⁺, 313 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.73。

実施例 13-119

N^1 -(4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-イル)- N^1 , N^2 , N^2 -トリメチルエタン-1, 2-ジアミン

5 NMR($CDCl_3$): δ 7.83 (d, $J = 7.5$ Hz, 1H), 7.44 (dd, $J = 7.5, 6.6$ Hz, 1H), 7.27 (d, $J = 8.7$ Hz, 1H), 6.97 (dd, $J = 8.7, 6.6$ Hz, 1H), 3.82 (m, 4H), 3.69 (t, $J = 6.9$ Hz, 2H), 3.11 (s, 3H), 2.41 (t, $J = 6.9$ Hz, 2H), 2.17 (s, 6H), 1.87 (m, 4H), 1.55 (m, 4H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 328 ($M + H$)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.98。

10

実施例 13-120

N^2 -(4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-イル)- N^1 , N^1 -ジメチルグリシンアミド

15 NMR($CDCl_3$): δ 7.85 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.47 (dd, $J = 7.2, 7.2$ Hz, 1H), 7.25 (d, $J = 8.4$ Hz, 1H), 7.00 (dd, $J = 8.4, 7.2$ Hz, 1H), 4.10 (d, $J = 5.4$ Hz, 2H), 3.81 (m, 4H), 3.01 (s, 3H), 2.84 (s, 3H), 1.85 (m, 4H), 1.55 (m, 4H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 328 ($M + H$)⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.12。

20 実施例 13-121

4-アゼパン-1-イル-N-(1-メチル-2-ピペリジン-1-イルエチル)キナゾリン-2-アミン

実施例 14-01~実施例 14-84

25 相当する化合物を用いて参考例 1→実施例 1で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 1 4 - 0 1

N^1 - (6 - アゼパン - 1 - イルピリミジン - 4 - イル) - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1, 2 - ジアミン

5 NMR(DMSO- d_6) : δ 7.93 (s, 1H), 6.32 (m, 1H), 5.44 (s, 1H), 3.49 (m, 4H), 3.25 (dt, J = 6.0, 6.3 Hz, 2H), 2.34 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.15 (s, 6H), 1.65 (m, 4H), 1.44 (m, 4H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 264 ($M + H$)⁺, 219, 132.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : R_f 0.38 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

10

実施例 1 4 - 0 2

N^1 - (4 - アゼパン - 1 - イル - 6, 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - イル) - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1, 2 - ジアミン

15 NMR(DMSO- d_6) : δ 1.47 (m, 4H), 1.67 (m, 4H), 1.85 (m, 2H), 2.18 (s, 6H), 2.39 (t, J = 6.90 Hz, 2H), 2.86 (m, 2H), 3.27 (m, 4H), 3.61 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 5.95 (m, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 304 ($M + H$)⁺, 152.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : R_f 0.31 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

20

実施例 1 4 - 0 3

N^1 - (4 - アゼパン - 1 - イル - 5, 6, 7, 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - イル) - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1, 2 - ジアミン

25 NMR(DMSO- d_6) : δ 1.49 (m, 4H), 1.58 (m, 2H), 1.70 (m, 6H), 2.18 (s, 6H), 2.41 (m, 4H), 3.26 (m, 4H), 3.51 (m, 4H), 5.97 (m, 1H) ;

MS(ESI, Pos. 20 V) : 318 ($M + H$)⁺, 159.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

T L C : R f 0.31 (CHCl_3 : MeOH : NH_4OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 0 4

N^1 - (4 - アゼパン - 1 - イル - 6 - クロロピリミジン - 2 - イル) - N^2 ,

5 N^2 - ジメチルエタン - 1 , 2 - ジアミン

NMR(CDCl_3) : δ 1.55 (m, 4H), 1.78 (m, 4H), 2.28 (s, 6H), 2.51 (t, J = 6.30 Hz, 2H), 3.46 (m, 6H), 5.33 (m, 1H), 5.79 (s, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 300, 298 ($\text{M} + \text{H}$)⁺ ;

T L C : R f 0.45 (CHCl_3 : MeOH : NH_4OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

10

実施例 1 4 - 0 5

N^1 - (4 - アゼパン - 1 - イル - 6 - メトキシキナゾリン - 2 - イル) - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1 , 2 - ジアミン

15 NMR(CDCl_3) : 1.69 (m, 4H), 1.97 (m, 4H), 2.27 (s, 6H), 2.53 (t, J = 6.50 Hz, 2H), 3.56 (m, 2H), 3.85 (m, 4H), 3.82 (s, 3H), 5.40 (m, 1H), 7.21 (m, 2H), 7.45 (d, J = 9.60 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 344 ($\text{M} + \text{H}$)⁺, 172.5 ($\text{M} + 2\text{H}$)²⁺ ;

T L C : R f 0.43 (CHCl_3 : MeOH : NH_4OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

20

実施例 1 4 - 0 6

N^1 - (4 - アゼパン - 1 - イル - 6 , 7 , 8 , 9 - テトラヒドロ - 5 H - シクロヘプタ [d] ピリミジン - 2 - イル) - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1 , 2 - ジアミン

25 NMR(CD_3OD) : δ 1.63 (m, 8H), 1.82 (m, 6H), 2.32 (s, 6H), 2.59 (m, 4H), 2.70 (m, 2H), 3.47 (t, J = 6.80 Hz, 2H), 3.54 (m, 4H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 332 ($\text{M} + \text{H}$)⁺, 318, 166.5 ($\text{M} + 2\text{H}$)²⁺ ;

T L C : R f 0.40 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 0 7

5 N¹-[4-アゼパン-1-イル-5-(トリフルオロメチル)ピリミジン-
2-イル]-N², N²-ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.46 (m, 4H), 1.69 (m, 4H), 2.16 (s, 6H), 2.41 (t, J = 6.50 Hz, 2H), 3.44 (q, J = 6.50 Hz, 2H), 3.69 (m, 4H), 6.61 (m, 1H), 8.04 (s, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 332 (M + H)⁺, 166.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.69 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

10

実施例 1 4 - 0 8

N-(4-ピペリジン-1-イルチエノ[3, 2-d]ピリミジン-2-イル)
エタン-1, 2-ジアミン

15 NMR(CDCl₃): 1.68 (m, 6H), 2.01 (m, 2H), 2.94 (m, 2H), 3.50 (q, J = 5.70 Hz, 2H),
3.86 (t, J = 5.70 Hz, 4H), 5.05 (m, 1H), 7.10 (d, J = 5.10 Hz, 1H), 7.53 (d, J = 5.10
Hz, 1H) ;

M S (EI, Pos.) : 277 (M+), 247, 235, 219, 205, 191, 179, 165, 151, 135 ;

T L C : R f 0.15 (CH₂Cl₂ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

20

実施例 1 4 - 0 9

N-(4-アゼパン-1-イルチエノ[3, 2-d]ピリミジン-2-イル)
ブタン-1, 4-ジアミン

NMR(CDCl₃): δ 1.60 (m, 8H), 1.86 (m, 6H), 2.74 (m, 2H), 3.42 (m, 2H), 3.87 (t,
J = 6.00 Hz, 4H), 4.81 (m, 1H), 7.07 (d, J = 5.50 Hz, 1H), 7.52 (d, J = 5.50 Hz, 1H) ;

25 M S (EI, Pos.) : 319 (M+), 303, 289, 276, 261, 248, 233, 219, 205 ;

T L C : R f 0.13 (CH₂Cl₂ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 1 0

N^1 - [4 - アゼパン - 1 - イル - 5 - (4 - メチルフェニル) ピリミジン - 2 - イル] - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1, 2 - ジアミン

5 NMR(DMSO- d_6): δ 1.34 (m, 4H), 1.54 (m, 4H), 2.18 (s, 6H), 2.30 (s, 3H), 2.41 (t, $J = 6.90$ Hz, 2H), 3.31 (m, 6H), 6.33 (m, 1H), 7.15 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.10 (d, $J = 8.4$ Hz, 2H), 7.52 (s, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 354 ($M + H$)⁺, 177.5 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: Rf 0.31 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10

実施例 1 4 - 1 1

N^1 - [4 - アゼパン - 1 - イル - 5 - (4 - メトキシフェニル) ピリミジン - 2 - イル] - N^2 , N^2 - ジメチルエタン - 1, 2 - ジアミン

15 NMR(DMSO- d_6): δ 1.36 (m, 4H), 1.52 (m, 4H), 2.18 (s, 6H), 2.41 (t, $J = 7.10$ Hz, 2H), 3.31 (m, 6H), 3.75 (s, 3H), 6.30 (m, 1H), 6.91 (d, $J = 8.80$ Hz, 2H), 7.14 (d, $J = 8.80$ Hz, 2H), 7.51 (s, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 370 ($M + H$)⁺, 185.5 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: Rf 0.27 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

20 実施例 1 4 - 1 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3S) - 1 - ベンジルピロリジン - 3 - イル] - 6, 7 - ジヒドロ - 5H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

25 NMR(DMSO- d_6): δ 1.42 (m, 4H), 1.64 (m, 6H), 1.83 (m, 2H), 2.08 (m, 1H), 2.25 (dd, $J = 9.20, 5.50$ Hz, 2H), 2.42 (m, 2H), 2.76 (m, 1H), 2.85 (t, $J = 7.10$ Hz, 2H), 3.52 (s, 2H), 3.57 (m, 4H), 4.23 (m, 1H), 6.21 (m, 1H), 7.23 (m, 5H);

M S (ESI, Pos, 20 V) : 392 (M + H)⁺, 302, 233 ;

T L C : R f 0.44 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 1 3

§ 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-ベンジルピロリジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5 H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.53 (m, 4H), 1.71 (m, 5H), 1.96 (m, 2H), 2.29 (m, 1H), 2.42 (m, 1H), 2.54 (m, 1H), 2.69 (m, 3H), 2.91 (m, 3H), 3.61 (s, 2H), 3.66 (t, J = 6.20 Hz, 4H),
10 4.44 (m, 1H), 5.27 (m, 1H), 7.32 (m, 5H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 392 (M + H)⁺, 358, 302 ;

T L C : R f 0.55 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

実施例 1 4 - 1 4

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)ピロリジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5 H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.43 (m, 4H), 1.66 (m, 6H), 1.84 (m, 2H), 2.10 (m, 1H), 2.33 (m, J = 7.32, 7.32 Hz, 1H), 2.57 (m, 2H), 2.84 (m, 4H), 3.58 (t, J = 6.00 Hz, 4H),
20 3.66 (s, 2H), 4.20 (m, 1H), 6.25 (m, 1H), 7.22 (m, 1H), 7.41 (d, J = 7.90 Hz, 1H), 7.72 (td, J = 7.90, 1.70 Hz, 1H), 8.45 (m, 1H) ;

M S (ESI, Pos, 20 V) : 393 (M + H)⁺, 197 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.41 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

25 実施例 1 4 - 1 5

4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)

ピロリジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピ
リミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.54 (m, 4H), 1.73 (m, 5H), 2.01 (m, 2H), 2.31 (m, 1H), 2.52
(dd, J = 9.50, 5.50 Hz, 1H), 2.68 (m, 2H), 2.75 (t, J = 8.00 Hz, 2H), 2.93 (t, J = 7.00
5 Hz, 2H), 3.03 (dd, J = 9.50, 6.80 Hz, 1H), 3.69 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.76 (d, J =
13.70 Hz, 1H), 3.82 (d, J = 13.70 Hz, 1H), 4.45 (m, 1H), 6.94 (m, 1H), 7.15 (ddd, J =
7.70, 4.90, 0.90 Hz, 1H), 7.43 (d, J = 7.70 Hz, 1H), 7.65 (td, J = 7.70, 1.70 Hz, 1H),
8.54 (ddd, J = 4.90, 1.70, 0.90 Hz, 1H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 393 (M + H)⁺, 197 (M + 2H)²⁺;

10 TLC: R_f 0.26 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 14-16

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピロリ
ジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジ
15 ン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 0.81 (m, 6H), 1.28 (m, 4H), 1.47 (m, 4H), 1.63 (m, 6H), 1.85
(m, 2H), 2.05 (m, 1H), 2.22 (m, 2H), 2.48 (m, 5H), 2.75 (m, 1H), 2.86 (m, 2H), 3.61
(t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.18 (m, 1H), 6.19 (m, 1H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 386 (M + H)⁺, 233, 193.5 (M + 2H)²⁺;

20 TLC: R_f 0.57 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 14-17

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピロリ
ジン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジ
25 ン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 0.85 (t, J = 7.10 Hz, 6H), 1.35 (m, 5H), 1.56 (m, 4H), 1.76 (m,

5H), 1.99 (m, 2H), 2.31 (m, 4H), 2.61 (m, 2H), 2.72 (t, $J = 7.80$ Hz, 2H), 2.94 (m, 3H), 3.70 (t, $J = 6.00$ Hz, 4H), 4.41 (m, 1H), 6.42 (m, 1H)

MS (ESI, Pos. 20 V) : 386 ($M + H$)⁺, 302, 233, 193.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

5

実施例 14-18

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルピロリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペント[d]ピリミジン-2-アミン

10 NMR(DMSO-d₆) : δ 0.84 (d, $J = 6.60$ Hz, 6H), 1.45 (m, 4H), 1.61 (m, 6H), 1.85 (m, 2H), 2.08 (m, 3H), 2.24 (m, 1H), 2.45 (m, 4H), 2.74 (m, 1H), 2.86 (t, $J = 7.10$ Hz, 2H), 3.61 (t, $J = 6.00$ Hz, 4H), 4.19 (m, 1H), 6.17 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos, 20 V) : 358 ($M + H$)⁺, 233, 179.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

TLC : Rf 0.45 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15

実施例 14-19

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピロリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペント[d]ピリミジン-2-アミン

20 NMR(CDCl₃) : δ 0.91 (d, $J = 6.60$ Hz, 6H), 1.55 (m, 4H), 1.75 (m, 6H), 1.97 (m, 2H), 2.25 (m, 3H), 2.41 (m, 1H), 2.52 (m, 1H), 2.62 (m, 1H), 2.69 (t, $J = 7.80$ Hz, 2H), 2.87 (m, 1H), 2.94 (t, $J = 7.20$ Hz, 2H), 3.68 (t, $J = 6.00$ Hz, 4H), 4.44 (m, 1H), 5.26 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 358 ($M + H$)⁺, 179.5 ($M + 2H$)²⁺ ;

25 TLC : Rf 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

実施例 1 4 - 2 0

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.41 (m, 4H), 1.65 (m, 8H), 2.10 (m, 1H), 2.24 (dd, J = 9.00, 5.60 Hz, 1H), 2.45 (m, 6H), 2.78 (dd, J = 9.00, 7.10 Hz, 1H), 3.34 (m, 1H), 3.48 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.03 (s, 2H), 4.23 (m, 1H), 6.19 (m, 1H), 7.23 (m, 5H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 406 (M + H)⁺, 316;

TLC: Rf 0.43 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10 実施例 1 4 - 2 1

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-ベンジルピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): 1.54 (m, 4H), 1.66 (m, 4H), 1.75 (m, 5H), 2.27 (m, 1H), 2.41 (dd, J = 9.50, 4.80 Hz, 1H), 2.48 (m, 3H), 2.60 (m, 3H), 2.90 (dd, J = 9.50, 6.60 Hz, 1H), 3.57 (t, J = 6.20 Hz, 4H), 3.60 (s, 2H), 4.43 (m, 1H), 5.12 (m, 1H), 7.26 (m, 5H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 406 (M + H)⁺, 316;

TLC: Rf 0.55 (AcOEt: MeOH: TEA = 20:2:1)。

実施例 1 4 - 2 2

20 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)ピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.45 (m, 4H), 1.59 (m, 10H), 2.09 (m, 1H), 2.32 (m, 3H), 2.48 (m, 4H), 2.84 (t, J = 7.80 Hz, 1H), 3.49 (t, J = 5.80 Hz, 4H), 3.66 (s, 2H), 4.20 (m, 1H), 6.23 (m, 1H), 7.23 (m, 1H), 7.41 (d, J = 7.90 Hz, 1H), 7.72 (m, 1H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 407 (M + H)⁺, 204 (M + 2H)²⁺;

T L C : R f 0.36 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 2 3

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - (ピリジン - 2 - イルメチル)
5 ピロリジン - 3 - イル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 -
アミン

NMR (CDCl₃) : δ 1.55 (m, 4H), 1.66 (m, 3H), 1.76 (m, 6H), 2.30 (m, 1H), 2.49 (m,
3H), 2.64 (m, 3H), 2.73 (m, 1H), 2.99 (dd, J = 9.50, 6.80 Hz, 1H), 3.62 (t, J = 5.90
Hz, 4H), 3.75 (d, J = 13.70 Hz, 1H), 3.81 (d, J = 13.70 Hz, 1H), 4.45 (m, 1H), 6.36
10 (m, 1H), 7.15 (ddd, J = 7.60, 4.80, 1.20 Hz, 1H), 7.43 (d, J = 7.60 Hz, 1H), 7.65 (td, J
= 7.60, 1.80 Hz, 1H), 8.54 (ddd, J = 4.80, 1.80, 1.20 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 407 (M + H)⁺, 204 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

15 実施例 1 4 - 2 4

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (2 - エチルブチル) ピロリ
ジン - 3 - イル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR (DMSO-d₆) : δ 0.80 (m, 6H), 1.28 (m, 4H), 1.48 (m, 4H), 1.63 (m, 10H),
2.03 (m, 1H), 2.22 (m, 3H), 2.49 (m, 6H), 2.79 (m, 1H), 3.51 (t, J = 5.90 Hz, 4H),
20 4.17 (m, 1H), 6.15 (m, 1H) ;

M S (ESI, Pos, 20 V) : 400 (M + H)⁺, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.40 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 2 5

25 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - (2 - エチルブチル) ピロリ
ジン - 3 - イル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR(CDCl₃) : δ 0.85 (t, J = 6.40 Hz, 6H), 1.35 (m, 5H), 1.57 (m, 4H), 1.67 (m, 4H), 1.78 (m, 5H), 2.27 (m, 3H), 2.35 (dd, J = 9.50, 4.90 Hz, 1H), 2.49 (t, J = 5.90 Hz, 2H), 2.58 (m, 2H), 2.64 (t, J = 6.60 Hz, 2H), 2.88 (dd, J = 9.20, 6.80 Hz, 1H), 3.63 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 4.40 (m, 1H), 5.97 (m, 1H) ;

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 400 (M + H)⁺, 316, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

実施例 1 4 - 2 6

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - イソブチルピロリジン - 3 -
10 イル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 0.84 (d, J = 6.60 Hz, 6H), 1.49 (m, 4H), 1.62 (m, 10H), 2.07 (m, 3H), 2.23 (m, 1H), 2.47 (m, 6H), 2.75 (m, 1H), 3.51 (m, 4H), 4.17 (m, 1H), 6.15 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos, 20 V) : 372 (M + H)⁺, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 T L C : R f 0.38 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 2 7

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - イソブチルピロリジン - 3 -
20 イル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR (CDCl₃) : δ 0.91 (d, J = 6.60 Hz, 6H), 1.57 (m, 4H), 1.68 (m, 5H), 1.77 (m, 6H), 2.21 (m, 2H), 2.27 (m, 1H), 2.35 (dd, J = 9.30, 5.10 Hz, 1H), 2.50 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 2.57 (m, 1H), 2.64 (t, J = 6.50 Hz, 2H), 2.91 (dd, J = 9.30, 6.80 Hz, 1H), 3.63 (t, J = 6.10 Hz, 4H), 4.40 (m, 1H), 6.09 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 372 (M + H)⁺, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 T L C : R f 0.45 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

実施例 1 4 - 2 8

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

5 NMR(DMSO- d_6): δ 1.14 (m, 6H), 1.49 (m, 4H), 1.62 (m, 6H), 1.79 (m, 4H), 1.99 (m, 2H), 2.29 (m, 1H), 2.55 (m, 5H), 2.86 (m, 3H), 3.60 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.15 (m, 1H), 6.14 (m, 1H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 384 (M + H)⁺, 302, 192.5 (M + 2H)²⁺;

TLC: Rf 0.39 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10

実施例 1 4 - 2 9

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

15 NMR(DMSO- d_6): δ 1.15 (m, 6H), 1.46 (m, 4H), 1.66 (m, 10H), 1.82 (m, 2H), 2.02 (m, 2H), 2.33 (m, 1H), 2.48 (m, 2H), 2.58 (m, 1H), 2.86 (m, 3H), 3.61 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.17 (m, 1H), 6.12 (m, 1H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 384 (M + H)⁺, 302;

TLC: Rf 0.50 (AcOEt: MeOH: TEA = 20:2:1)。

20

実施例 1 4 - 3 0

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]-5,6,7,8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

25 NMR(DMSO- d_6): δ 1.17 (m, 6H), 1.63 (m, 16H), 1.99 (m, 2H), 2.28 (m, 1H), 2.48 (m, 7H), 2.85 (t, J = 8.00 Hz, 1H), 3.51 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.15 (m, 1H), 6.14 (m, 1H);

M S (ESI, Pos, 20 V) : 398 (M + H)⁺, 316, 199.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.39 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 3 1

5 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.15 (m, 6H), 1.48 (m, 7H), 1.68 (m, 11H), 1.98 (m, 2H), 2.29 (dd, J = 9.10, 5.80 Hz, 1H), 2.45 (m, 5H), 2.85 (t, J = 8.40 Hz, 1H), 3.51 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 4.15 (m, 1H), 6.13 (m, 1H) ;

10 M S (ESI, Pos. 20 V) : 398 (M + H)⁺, 316, 199.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.50 (AcOEt : MeOH : TEA = 2 0 : 2 : 1)。

実施例 1 4 - 3 2

6-アゼパン-1-イル-N-(1-ベンジルピロリジン-3-イル)-9
15 H-プリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.44 (m, 4H), 1.73 (m, 6H), 2.11 (m, 1H), 2.30 (dd, J = 9.00, 5.20 Hz, 1H), 2.50 (m, 2H), 2.80 (dd, J = 9.00, 7.00 Hz, 1H), 3.54 (s, 2H), 3.80 (m, 2H), 4.25 (m, 2H), 6.13 (d, J = 6.80 Hz, 1H), 7.23 (m, 5H), 7.61 (s, 1H), 12.15 (m, 1H) ;

20 M S (LC-MS, APCI, Pos. 20 V) : 392 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.40 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

実施例 1 4 - 3 3

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル)-5,
25 7-ジヒドロフロ[3, 4-d]ピリミジン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆) : δ 1.08 (m, 6H), 1.45 (m, 6H), 1.72 (m, 10H), 1.99 (m, 1H),

2.27 (m, 2H), 2.66 (m, 1H), 2.97 (m, 1H), 3.50 (m, 4H), 3.78 (m, 1H), 4.56 (s, 2H),
5.04 (s, 2H), 6.22 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos, 20 V) : 400 (M + H)⁺, 318, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.59 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

5

実施例 14-34

6-アゼパン-1-イル-2-[(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル) アミノ] ピリミジン-4-カルボン酸・二塩酸塩

10 NMR(CD₃OD) : δ 1.23 (m, 2H), 1.39 (m, 3H), 1.63 (m, 6H), 1.86 (m, 6H), 2.13
(m, 5H), 3.06 (m, 1H), 3.21 (m, 1H), 3.51 (m, 1H), 3.72 (m, 2H), 3.79 (m, 2H), 4.01
(m, 1H), 4.06 (m, 1H), 4.56 (m, 1H), 6.98 (s, 1H) ;

MS (FAB, Pos., matrix = Glycerin + m-NBA) : 402 (M + H)⁺, 237 ;

TLC : Rf 0.25 (AcOEt : MeOH : TEA = 20 : 2 : 1)。

15

実施例 14-35

6-アゼパン-1-イル-2-[(1-ベンジルピペリジン-3-イル) アミ
ノ] ピリミジン-4-カルボキサミド

20 NMR(CDCl₃) : δ 1.52 (m, 6H), 1.74 (m, 6H), 2.20 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.47 (m,
1H), 2.84 (m, 1H), 3.46 (d, J = 13.20 Hz, 1H), 3.56 (d, J = 13.20 Hz, 1H), 3.68 (m,
4H), 4.04 (m, 1H), 5.04 (m, 1H), 5.48 (m, 1H), 6.65 (s, 1H), 7.28 (m, 5H), 7.67 (m,
1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 409 (M + H)⁺, 319 ;

TLC : Rf 0.60 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

25

実施例 14-36

6-アゼパン-1-イル-2-(ピペリジン-3-イルアミノ) ピリミジン

- 4 - カルボキサミド

NMR(CDCl₃): δ 1.52 (m, 5H), 1.75 (m, 6H), 1.98 (m, 1H), 2.60 (m, 1H), 2.74 (m, 1H), 2.90 (m, 1H), 2.99 (m, 1H), 3.36 (m, 1H), 3.50 (m, 2H), 3.71 (m, 2H), 4.06 (m, 1H), 4.96 (d, J = 7.50 Hz, 1H), 5.71 (m, 1H), 6.68 (s, 1H), 7.89 (m, 1H) ;

5 MS (ESI, Pos. 20 V) : 319 (M + H)⁺, 236, 160 (M + 2H)²⁺ ;

TLC : Rf 0.20 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 14-37

6-アゼパン-1-イル-2-[(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル) アミノ] ピリミジン-4-カルボキサミド

10 NMR(CDCl₃): δ 1.22 (m, 6H), 1.53 (m, 6H), 1.76 (m, 10H), 2.27 (m, 2H), 2.44 (m, 1H), 2.62 (m, 1H), 2.98 (m, 1H), 3.51 (m, 2H), 3.74 (m, 2H), 4.01 (m, 1H), 5.04 (m, 1H), 5.47(m, 1H), 6.66 (s, 1H), 7.77 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 401 (M + H)⁺, 319, 201 (M + 2H)²⁺ ;

15 TLC : Rf 0.28 (CHCl₃ : MeOH = 10 : 1)。

実施例 14-38

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-ベンジルアゼパン-3-イル]-6, 7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ [d] ピリミジン-2-アミン

20 NMR(DMSO-d₆): δ 1.39 (m, 5H), 1.67 (m, 8H), 1.86 (m, 3H), 2.52 (m, 5H), 2.83 (m, 3H), 3.57 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 3.62 (s, 2H), 3.96 (m, 1H), 5.83 (m, 1H), 7.27 (m, 5H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 839 (2M + H)⁺, 420 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16 ;

25 TLC : Rf 0.42 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

実施例 1 4 - 3 9

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - ベンジルアゼパン - 3 - イル]
- 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.42 (m, 6H), 1.60 (m, 8H), 1.84 (m, 2H), 2.51 (m, 5H), 2.82
5 (m, 3H), 3.57 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.62 (s, 2H), 3.97 (m, 1H), 5.86 (m, 1H), 7.25 (m,
5H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 839 (2M + H)⁺, 420 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.18 ;

TLC : Rf 0.50 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

10

実施例 1 4 - 4 0

N - [(3 S) - アゼパン - 3 - イル] - 4 - アゼパン - 1 - イル - 6 , 7 -
ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.44 (m, 5H), 1.54 (m, 4H), 1.70 (m, 5H), 1.84 (m, 2H), 2.49
15 (m, 2H), 2.58 (dd, J = 13.60, 7.00 Hz, 1H), 2.71 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 2.87 (m, 3H),
3.59 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.85 (m, 1H), 5.83 (m, 1H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 330 (M + H)⁺, 165.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.03 ;

TLC : Rf 0.38 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

20

実施例 1 4 - 4 1

N - [(3 R) - アゼパン - 3 - イル] - 4 - アゼパン - 1 - イル - 6 , 7 -
ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.45 (m, 5H), 1.54 (m, 4H), 1.68 (m, 5H), 1.84 (m, 2H), 2.49
25 (m, 2H), 2.58 (dd, J = 13.60, 7.10 Hz, 1H), 2.71 (t, J = 5.90 Hz, 2H), 2.87 (m, 3H),
3.59 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.86 (m, 1H), 5.86 (m, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 330 (M + H)⁺, 165.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05 ;

T L C : R f 0.38 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

5 実施例 1 4 - 4 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (ピリジン - 2 - イルメチル) アゼパン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

10 実施例 1 4 - 4 3

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - (ピリジン - 2 - イルメチル) アゼパン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

15 実施例 1 4 - 4 4

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (2 - エチルブチル) アゼパン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

M S (ESI, Pos. 20 V) : 414 (M + H)⁺, 330, 207.5 (M + 2H)²⁺ ;

20 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.25。

実施例 1 4 - 4 5

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - (2 - エチルブチル) アゼパン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

25 M S (ESI, Pos. 20 V) : 414 (M + H)⁺, 330, 207.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 1 4 - 4 6

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - イソブチルアゼパン - 3 - イ
5 ル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミ
ン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺, 330, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

10 実施例 1 4 - 4 7

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - イソブチルアゼパン - 3 - イ
ル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミ
ン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 4 - 4 8

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - シクロヘキシルアゼパン - 3
- イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 -
20 アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 412 (M + H)⁺, 386, 330, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 4 - 4 9

25 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - シクロヘキシルアゼパン - 3
- イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 -

アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 412 (M + H)⁺, 386, 330, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

5 実施例 1 4 - 5 0

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - ベンジルアゼパン - 3 - イル]
- 5, 6, 7, 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR (DMSO-d₆) : δ 1.45 (m, 4H), 1.56 (m, 6H), 1.77 (m, 8H), 2.47 (m, 5H), 2.79
(m, 1H), 3.16 (d, J = 5.10 Hz, 2H), 3.48 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.62 (s, 2H), 3.91 (m,
10 1H), 5.85 (m, 1H), 7.25 (m, 5H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 434 (M + H)⁺, 344 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23 ;

TLC : R_f 0.42 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)。

15 実施例 1 4 - 5 1

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - ベンジルアゼパン - 3 - イル]
- 5, 6, 7, 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

NMR (DMSO-d₆) : δ 1.45 (m, 4H), 1.56 (m, 6H), 1.75 (m, 8H), 2.47 (m, 5H),
2.79 (dd, J = 13.10, 3.90 Hz, 1H), 3.16 (d, J = 5.00 Hz, 2H), 3.47 (t, J = 6.00 Hz, 4H),
20 3.62 (s, 2H), 3.94 (m, 1H), 5.83 (m, 1H), 7.23 (m, 5H) ;

MS (ESI, Pos. 20 V) : 434 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23 ;

TLC : R_f 0.42 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 10 : 1)

25 実施例 1 4 - 5 2

N - [(3 R) - アゼパン - 3 - イル] - 4 - アゼパン - 1 - イル - 5, 6,

7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.46 (m, 6H), 1.56 (m, 5H), 1.69 (m, 7H), 2.39 (m, 4H), 2.56 (m, 1H), 2.71 (t, $J = 5.90$ Hz, 2H), 2.88 (dd, $J = 13.50, 4.30$ Hz, 1H), 3.50 (t, $J = 6.00$ Hz, 4H), 3.83 (m, 1H), 5.84 (m, 1H);

5 MS(ESI, Pos. 20 V): 344 ($M + H$)⁺, 172.5 ($M + 2H$)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11;

TLC: R_f 0.38 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 14-53

10 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

実施例 14-54

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)アゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

実施例 14-55

20 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)アゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS(ESI, Pos. 20 V): 428 ($M + H$)⁺, 344, 214.5 ($M + 2H$)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.33。

25 実施例 14-56

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)アゼパ

ン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 428 (M + H)⁺, 344, 214.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

5 実施例 14-57

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルアゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 400 (M + H)⁺, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

10

実施例 14-58

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルアゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 400 (M + H)⁺, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

15

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 14-59

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルアゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

20 MS (ESI, Pos. 20 V) : 426 (M + H)⁺, 400, 344, 213.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 14-60

25 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルアゼパン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 426 (M + H)⁺, 400, 344, 213.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.27。

実施例 1 4 - 6 1

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - ベンジルピペリジン - 3 - イ
5 ル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミ
ン

MS (ESI, Pos.20V) : 811 (2M + H)⁺, 406 (M + H)⁺, 316 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

10 実施例 1 4 - 6 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - ベンジルピペリジン - 3 - イ
ル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミ
ン

MS (ESI, Pos.20V) : 811 (2M + H)⁺, 406 (M + H)⁺, 316 ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 1 4 - 6 3

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - (ピリジン - 2 - イルメチル)
ピペリジン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピ
20 リミジン - 2 - アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 407 (M + H)⁺, 204 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 1 4 - 6 4

25 4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - (ピリジン - 2 - イルメチル)
ピペリジン - 3 - イル] - 6 , 7 - ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピ

リミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 407 (M + H)⁺, 204 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

5 実施例 14-65

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 799 (2M + H)⁺, 400 (M + H)⁺, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

10 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 14-66

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

15

MS (ESI, Pos.20V) : 799 (2M + H)⁺, 400 (M + H)⁺, 200.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

実施例 14-67

20

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺, 316, 186.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

25

実施例 14-68

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 743 (2M + H)⁺, 372 (M + H)⁺, 344, 186.5 (M + 2H)²⁺;

5 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.11。

実施例 14-69

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 398 (M + H)⁺, 372, 316, 199.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.16。

実施例 14-70

15 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

MS(ESI, Pos.20V): 795 (2M + H)⁺, 398 (M + H)⁺, 199.5 (M + 2H)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 3.16。

20

実施例 14-71

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-ピペリジン-3-イル]-6,7-ジヒドロ-5H-シクロペンタ[d]ピリミジン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.48 (m, 2H), 1.54 (m, 4H), 1.74 (m, 4H), 1.98 (m, 4H), 2.52 (dd, J = 11.70, 8.20 Hz, 1H), 2.62 (m, 1H), 2.67 (t, J = 7.10 Hz, 2H), 2.87 (m, 1H), 2.94 (t, J = 7.10 Hz, 2H), 3.25 (dd, J = 11.70, 3.70 Hz, 1H), 3.67 (t, J = 6.00 Hz, 4H),

3.84 (m, 1H), 4.82 (d, J = 7.90 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 631 (2M + H)⁺, 316 (M + H)⁺, 158.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.17 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

5 実施例 1 4 - 7 2

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - ピペリジン - 3 - イル] - 6 , 7
- ジヒドロ - 5 H - シクロペンタ [d] ピリミジン - 2 - アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.33 (m, 2H), 1.45 (m, 4H), 1.56 (m, 1H), 1.66 (m, 4H), 1.83
(m, 3H), 2.31 (dd, J = 11.40, 8.70 Hz, 1H), 2.41 (m, 3H), 2.73 (m, 1H), 2.86 (t, J =
10 7.10 Hz, 2H), 2.98 (dd, J = 11.40, 3.70 Hz, 1H), 3.59 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.70 (m,
1H), 5.93 (m, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 316 (M + H)⁺, 158.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.17 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 8 0 : 1 0 : 1)。

15 実施例 1 4 - 7 3

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 S) - 1 - ベンジルピペリジン - 3 - イ
ル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

M S (ESI, Pos.20V) : 839 (2M + H)⁺, 420 (M + H)⁺, 330 ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

20

実施例 1 4 - 7 4

4 - アゼパン - 1 - イル - N - [(3 R) - 1 - ベンジルピペリジン - 3 - イ
ル] - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロキナゾリン - 2 - アミン

M S (ESI, Pos.20V) : 839 (2M + H)⁺, 420 (M + H)⁺, 330 ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 1 4-7 5

4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
ピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-
アミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 421 (M + H)⁺, 402, 330, 211 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

実施例 1 4-7 6

4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-(ピリジン-2-イルメチル)
10 ピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-
アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 421 (M + H)⁺, 402, 330, 211 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.11。

15 実施例 1 4-7 7

4-アゼパン-1-イル-N-[(3 S)-1-(2-エチルブチル) ピペリ
ジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 827 (2M + H)⁺, 414 (M + H)⁺, 330, 207.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

20

実施例 1 4-7 8

4-アゼパン-1-イル-N-[(3 R)-1-(2-エチルブチル) ピペリ
ジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 414 (M + H)⁺, 330, 207.5 (M + 2H)²⁺ ;

25 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 1 4-7 9

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 771 (2M + H)⁺, 386 (M + H)⁺, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 4-8 0

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-イソブチルピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 771 (2M + H)⁺, 386 (M + H)⁺, 193.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.16。

実施例 1 4-8 1

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

15 MS (ESI, Pos.20V) : 823 (2M + H)⁺, 412 (M + H)⁺, 330, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 1 4-8 2

20 4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 823 (2M + H)⁺, 412 (M + H)⁺, 330, 206.5 (M + 2H)²⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

25 実施例 1 4-8 3

4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-ピペリジン-3-イル]-5, 6,

7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(CDCl₃): δ 1.47 (m, 2H), 1.56 (m, 4H), 1.67 (m, 2H), 1.76 (m, 6H), 1.99 (m, 2H), 2.49 (t, J = 6.70 Hz, 2H), 2.53 (m, 1H), 2.61 (t, J = 6.70 Hz, 2H), 2.66 (m, 1H), 2.89 (m, 1H), 3.24 (dd, J = 11.50, 3.50 Hz, 1H), 3.59 (t, J = 6.00 Hz, 4H), 3.81 (m, 1H), 4.88 (m, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 330 (M + H)⁺, 165.5 (M + 2H)²⁺;

TLC: Rf 0.17 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 14-84

4-アゼパン-1-イル-N-[(3R)-ピペリジン-3-イル]-5, 6, 7, 8-テトラヒドロキナゾリン-2-アミン

NMR(DMSO-d₆): δ 1.35 (m, 2H), 1.49 (m, 4H), 1.58 (m, 3H), 1.67 (m, 6H), 1.83 (m, 1H), 2.30 (dd, J = 11.80, 8.80 Hz, 1H), 2.44 (m, 5H), 2.72 (m, 1H), 2.97 (dd, J = 11.80, 3.60 Hz, 1H), 3.50 (t, J = 5.90 Hz, 4H), 3.63 (m, 1H), 5.91 (m, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 330 (M + H)⁺, 165.5 (M + 2H)²⁺;

TLC: Rf 0.17 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 15-01～実施例 15-55

相当する化合物を用いて参考例 1→実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 15-01

N²-(2-アミノエチル)-N⁴-ベンジル-N⁴-メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20V): 258 (M + H);

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.89。

実施例 15-02

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -(2-フェニルエチル)ピ
リミジン-2, 4-ジアミン

5 MS(ESI, Pos.20V) : 272 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.95。

実施例 15-03

10 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 , N^4 -ジイソペンチルピリミジン-2, 4
-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V) : 294 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.24。

実施例 15-04

15 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -[3-(ジメチルアミノ)プロピル]-
 N^4 -メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

MS(ESI, Pos.20V) : 253 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

20 実施例 15-05

1, 1'-(2-[(2-アミノエチル)アミノ]-4-ピリミジニルイミノ)
ジ(2-プロパノール)

実施例 15-06

25 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 , N^4 -ジブチルピリミジン-2, 4-ジア
ミン

MS (ESI, Pos.20V) : 266 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.10。

実施例 15-07

- 5 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^4 -メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

実施例 15-08

- 10 2-[2-[(2-アミノエチル)アミノ]ピリミジン-4-イル(ブチル)アミノ]エタノール

MS (ESI, Pos.20V) : 254 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ;

HPLC 保持時間 (分) : 2.79。

15 実施例 15-09

- N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 , N^4 -ビス(2-メトキシエチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

実施例 15-10

- 20 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -(2-ピリジン-2-イルエチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 273 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.86。

25 実施例 15-11

- N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -(1-メチルピペリジン-

4-イル) ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 265 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.81。

5 実施例 15-12

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 , N^4 -ビス[3-(ジメチルアミノ)プロ
ピル] ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 324 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

10

実施例 15-13

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -(2-メトキシエチル)- N^4 -メチルピ
リミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 226 (M +H) ;

15 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.69。

実施例 15-14

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -(4-ピリジン-3-イル
ブチル) ピリミジン-2, 4-ジアミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 301 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.14。

実施例 15-15

25 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -[(6-メチルピリジン-
2-イル)メチル] ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 273 (M +H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.92。

実施例 15-16

5 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -ベンジル- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)
エチル]ピリミジン-2,4-ジアミン

MS (ESI, Pos.20V) : 315 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.63。

実施例 15-17

10 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -(2-フリルメチル)- N^4 -メチルピリ
ミジン-2,4-ジアミン

実施例 15-18

15 4-[2-[(2-アミノエチル)アミノ]ピリミジン-4-イル(エチル)
アミノ]ブタン-1-オール

実施例 15-19

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 , N^4 -ビス(2-エトキシエチル)ピリミ
ジン-2,4-ジアミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 298 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.86。

実施例 15-20

25 N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -シクロヘキシルピリミジン-2,4-ジ
アミン

MS (ESI, Pos.20V) : 236 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.88。

実施例 15-21

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -[(5-メチル-2-フリル)メチル]ピ
5 リミジン-2, 4-ジアミン

実施例 15-22

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -(2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-
1-イル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 270 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.93。

実施例 15-23

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -(ピリジン-3-イルメチル)ピリミジ
15 ン-2, 4-ジアミン

実施例 15-24

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -(2-ピペリジン-1-イルエチル)ピ
リミジン-2, 4-ジアミン

20 MS (ESI, Pos.20V) : 265 (M+H) ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.90。

実施例 15-25

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -ベンジルピリミジン-2, 4-ジアミン

25 MS (ESI, Pos.20V) : 244 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.79。

実施例 15-26

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -シクロオクチルピリミジン-2,4-ジアミン

5 MS (ESI, Pos.20V) : 264 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.02。

実施例 15-27

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -ヘキシルピリミジン-2,4-ジアミン

10 MS (ESI, Pos.20V) : 238 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.99。

実施例 15-28

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -メチル- N^4 -フェニルピリミジン-2,4-ジアミン・二塩酸塩

15 NMR(CD₃OD) : δ 7.66-7.44 (m, 4H), 7.41-7.32 (m, 2H), 5.82 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 3.87 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 3.60 (s, 3H), 3.30 (t, J = 6.0 Hz, 2H) ;

MS (FAB, Pos., Glycerin + m-NBA) : 244 (M+H)⁺, 227, 201 ;

TLC : R_f 0.20 (n-BuOH : AcOH : H₂O = 4 : 2 : 1)。

20

実施例 15-29

N^2 -(2-アミノエチル)- N^4 -ベンジル- N^4 -フェニルピリミジン-2,4-ジアミン・二塩酸塩

25 NMR(CD₃OD) : δ 7.67 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 7.54-7.39 (m, 3H), 7.37-7.17 (m, 7H), 5.84 (d, J = 7.2 Hz, 1H), 5.34 (s, 2H), 3.77 (t, J = 6.0 Hz, 2H), 3.10 (t, J = 6.0 Hz, 2H) ;

M S (FAB, Pos., Glycerin + m-NBA) : 320 (M + H)⁺, 303, 230 ;

T L C : R f 0.26 (n-BuOH : AcOH : H₂O = 4 : 2 : 1)。

実施例 15-30

5 N²- (2-アミノエチル) -N⁴- (2-ピペリジン-1-イルエチル) ピリミジン-2, 4-ジアミン・二塩酸塩

NMR(DMSO-d₆): δ 1.39 (m, 1H), 1.79 (m, 5H), 2.95 (m, 4H), 3.24 (m, 2H), 3.48 (m, 2H), 3.71 (m, 2H), 3.94 (m, 2H), 6.17 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 7.74 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 8.43 (m, 4H), 9.51 (m, 1H), 10.75 (m, 1H) 12.70 (m, 1H) ;

10 M S (LC-MS, APCI, Pos. 20 V) : 265 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.38 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 80 : 20 : 4)。

実施例 15-31

15 2- [(4- [2- (ジメチルアミノ) エチル] アミノピリミジン-2-イル) (メチル) アミノ] エタノール

M S (ESI, Pos, 20 V) : 240 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.72。

実施例 15-32

20 N⁴- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -N²-メチル-N²- (1-ナフチルメチル) ピリミジン-2, 4-ジアミン

M S (ESI, Pos, 20 V) : 336 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.68。

25 実施例 15-33

N⁴- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -N²-ヘキシル-N²-メチルピリ

ミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 280 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.82。

5 実施例 15-34

N²-ベンジル-N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N²-エチルピリ

ミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 300 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.62。

10

実施例 15-35

N²-ベンジル-N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N²-メチルピリ

ミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 286 (M + H)⁺ ;

15

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.45。

実施例 15-36

N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N², N²-ビス(ピリジン-2-
イルメチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

20

MS (ESI, Pos, 20 V) : 364 (M + H)⁺, 214

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.05。

実施例 15-37

N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N²-メチル-N²-(1-メチル

25

ピペリジン-4-イル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 293 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.98。

実施例 15-38

5 N^2, N^4 -ビス [2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -メチルピリミジン
-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 267 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.96。

実施例 15-39

10 N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -メチル- N^2 -(2-フェニ
ルエチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 300 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.56。

15 実施例 15-40

N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -(2-フリルメチル)- N^2 -
メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 276 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

20

実施例 15-41

N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -[2-(1H-インドール
-3-イル)エチル]- N^2 -メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 339 (M + H)⁺ ;

25 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.47。

実施例 15-42

N^2 -シクロペンチル- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2,4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 250 (M + H)⁺ ;

5 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.22。

実施例 15-43

N^2 -シクロヘキシル- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2,4-ジアミン

10 MS (ESI, Pos, 20 V) : 527 (2M + H)⁺, 264 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

実施例 15-44

15 N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -(3-メチルシクロヘキシル)ピリミジン-2,4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.53。

実施例 15-45

20 N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -(4-メチルシクロヘキシル)ピリミジン-2,4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.55。

25 実施例 15-46

N^2 -(シクロヘキシルメチル)- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]

ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.53。

5 実施例 15-47

N²-(2, 3-ジヒドロ-1H-インデン-1-イル)-N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 595 (2M + H)⁺, 298 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.42。

10

実施例 15-48

N²-シクロヘキシル-N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N²-メチルピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 278 (M + H)⁺ ;

15 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.64。

実施例 15-49

N²-シクロヘプチル-N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2, 4-ジアミン

20 MS (ESI, Pos, 20 V) : 555 (2M + H)⁺, 278 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.55。

実施例 15-50

25 N⁴-[2-(ジメチルアミノ)エチル]-N²-(ピリジン-3-イルメチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 273 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.79。

実施例 1 5 - 5 1

5 N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -(ピリジン-4-イルメチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 273 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 2.78。

実施例 1 5 - 5 2

10 N^2 -ベンジル- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 543 (2M + H)⁺, 272 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.23。

15 実施例 1 5 - 5 3

N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]- N^2 -(2-フェニルエチル)ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 571 (2M + H)⁺, 286 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.34。

20

実施例 1 5 - 5 4

N^2 -ブチル- N^4 -[2-(ジメチルアミノ)エチル]ピリミジン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos, 20 V) : 238 (M + H)⁺ ;

25 HPLC 条件 : B ; HPLC 保持時間 (分) : 3.20。

実施例 15-55

6- (2- [(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル) アミノ] ピリミジン-4-イルアミノ) ヘキサン-1-オール

NMR(DMSO- d_6): δ 1.17 (m, 6H), 1.29 (m, 5H), 1.48 (m, 6H), 1.72 (m, 5H), 2.00 (m, 1H), 2.27 (m, 2H), 2.63 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 3.16 (m, 2H), 3.41 (m, 2H), 3.76 (m, 1H), 4.36 (m, 1H), 5.65 (d, $J = 5.70$ Hz, 1H), 6.03 (m, 1H), 6.83 (m, 1H), 7.58 (d, $J = 5.70$ Hz, 1H);

MS (ESI, Pos, 20 V): 376 ($M + H$)⁺, 294, 188.5 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: R_f 0.38 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 16-1 ~ 実施例 16-3

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

15 実施例 16-1

N, N'-ビス [2- (ジメチルアミノ) エチル] キナゾリン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20 V): 303 ($M + H$)⁺, 168;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 0.36。

20 実施例 16-2

N, N'-ビス (2-ピロリジン-1-イルエチル) キナゾリン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20 V): 355 ($M + H$)⁺, 178 ($M + 2H$)²⁺;

25 HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.59。

実施例 16-3

N, N'-ビス (2-ピペリジン-1-イルエチル) キナゾリン-2, 4-ジアミン

MS (ESI, Pos. 20 V) : 383 (M + H)⁺, 192 (M + 2H)²⁺ ;

5 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.68。

実施例 17-01 ~ 実施例 17-12

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

10

実施例 17-01

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -1, 1'-ビフェニル-4-カルボキサミド

MS (ESI, Pos. 20V) : 444 (M + H) ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.45。

実施例 17-02

N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N- [3- (ジメチルアミノ) プロピル] -1, 1'-ビフェニル-4-カルボキサミド

20 MS (ESI, Pos. 20V) : 458 (M + H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.29。

実施例 17-03

25 N- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) ピリミジン-2-イル] -N- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -1, 1'-ビフェニル-4-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 478 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.54。

実施例 17-04

5 N- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) ピリミジン-2-イル] -N- [3- (ジメチルアミノ) プロピル] -1, 1'-ビフェニル-4-カルボキサミド

MS (ESI, Pos.20V) : 492 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.44。

10

実施例 17-05

N- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -4- (ペンチルオキシ) -N- (4-ピペリジン-1-イルピリミジン-2-イル) ベンズアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 440 (M +H) ;

15 HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.47。

実施例 17-06

N- [3- (ジメチルアミノ) プロピル] -4- (ペンチルオキシ) -N- (4-ピペリジン-1-イルピリミジン-2-イル) ベンズアミド

20 MS (ESI, Pos.20V) : 454 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.36。

実施例 17-07

25 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -4- (ペンチルオキシ) ベンズアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 454 (M +H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.52。

実施例 17-08

5 N- (4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル) -N- [3- (ジメ
チルアミノ) プロピル] -4- (ペンチルオキシ) ベンズアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 468 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.39。

実施例 17-09

10 N- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) ピリミジ
ン-2-イル] -N- [2- (ジメチルアミノ) エチル] -4- (ペンチル
オキシ) ベンズアミド

MS (ESI, Pos.20V) : 488 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.66。

15

実施例 17-10

N- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1H) -イル) ピリミジ
ン-2-イル] -N- [3- (ジメチルアミノ) プロピル] -4- (ペンチ
ルオキシ) ベンズアミド

20 MS (ESI, Pos.20V) : 502 (M+H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.55。

実施例 17-11

25 3-シクロペンチル-N- [4- (3, 4-ジヒドロイソキノリン-2 (1
H) -イル) ピリミジン-2-イル] -N- [2- (ジメチルアミノ) エチ
ル] プロパンアミド

MS(ESI, Pos.20V) : 422 (M + H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.46。

実施例 17-12

5 3-シクロペンチル-N-[4-(3,4-ジヒドロイソキノリン-2(1H)-イル)ピリミジン-2-イル]-N-[3-(ジメチルアミノ)プロピル]プロパンアミド

MS(ESI, Pos.20V) : 436 (M + H) ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 3.26。

10

実施例 18-1 ~ 実施例 18-3

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

15 実施例 18-1

2-[(4-アゼパン-1-イルキナゾリン-2-イル)オキシ]-N,N-ジメチルエタンアミン

MS(ESI, Pos. 20 V) : 315 (M + H)⁺ ;

HPLC 条件 : A ; HPLC 保持時間 (分) : 2.83。

20

実施例 18-2

4-アゼパン-1-イル-N-(1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル)ピリミジン-2-カルボキサミド

25 NMR(CDCl₃) : δ 1.22 (m, 4H), 1.58 (m, 8H), 1.82 (m, 10H), 2.30 (m, 1H), 2.43 (m, 1H), 2.68 (m, 3H), 3.52 (m, 2H), 3.89 (m, 2H), 4.24 (m, 1H), 6.45 (d, J = 6.21 Hz, 1H), 8.28 (d, J = 6.21 Hz, 1H), 8.58 (d, J = 7.72 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 386 (M + H)⁺ ;

T L C : R f 0.53 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

実施例 18-3

5 N- (4-アゼパン-1-イル-1-オキシドピリミジン-2-イル) エタ
ン-1, 2-ジアミン

NMR (CDCl₃) : δ 1.54 (m, 4H), 1.76 (m, 4H), 1.98 (m, 2H), 2.94 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.52 (q, J = 6.00 Hz, 2H), 3.57 (m, 4H), 5.76 (d, J = 7.30 Hz, 1H), 7.26 (m, 1H), 7.84 (d, J = 7.30 Hz, 1H) ;

10 M S (ESI, Pos. 20 V) : 503 (2M + H)⁺, 252 (M + H)⁺, 126.5 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.13 (CHCl₃ : MeOH : NH₄OH = 40 : 10 : 1)。

実施例 19-01 ~ 実施例 19-12

相当する化合物を用いて参考例 1 → 実施例 1 で示される方法と同様にして、
15 以下の物性値を有する本発明化合物を得た。

実施例 19-01

6-アゼパン-1-イル-N- (1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル)
ピリジン-2-カルボキサミド

20 NMR (CDCl₃) : δ 1.22 (m, 4H), 1.68 (m, 18H), 2.28 (m, 1H), 2.41 (m, 1H), 2.67
(m, 3H), 3.65 (m, 4H), 4.20 (m, 1H), 6.61 (dd, J = 8.56, 0.67 Hz, 1H), 7.39 (dd, J =
7.22, 0.67 Hz, 1H), 7.53 (dd, J = 8.56, 7.22 Hz, 1H), 8.65 (d, J = 8.06 Hz, 1H) ;

M S (ESI, Pos. 20 V) : 385 (M + H)⁺, 193 (M + 2H)²⁺ ;

T L C : R f 0.62 (CHCl₃ : MeOH = 9 : 1)。

25

実施例 19-02

N^1 -(6-アゼパン-1-イルピリジン-2-イル)- N^2 , N^2 -ジメチル
グリシンアミド

NMR($CDCl_3$): δ 1.54 (m, 4H), 1.77 (m, 4H), 2.37 (s, 6H), 3.06 (s, 2H), 3.60 (t, J
= 6.04 Hz, 4H), 6.23 (dd, J = 7.81, 0.84 Hz, 1H), 7.38 (dd, J = 7.81, 0.84 Hz, 1H),
5 7.43 (t, J = 7.81 Hz, 1H), 9.09 (s, 1H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 277 ($M + H$)⁺;

TLC: Rf 0.76 (EtOAc: MeOH = 9:1)。

実施例 19-03

10 N^1 -(4-アゼパン-1-イルキノリン-2-イル)- N^2 , N^2 -ジメチル
エタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO- d_6): δ 7.74 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.43-7.33 (m, 2H), 7.05 (m, 1H),
6.51 (t, J = 5.1 Hz, 1H), 6.28 (s, 1H), 3.43 (dt, J = 5.1, 6.3 Hz, 2H), 3.27 (m, 4H),
2.42 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.18 (s, 6H), 1.82 (m, 4H), 1.69 (m, 4H);

15 MS (ESI, Pos. 20 V): 313 ($M + H$)⁺, 157 ($M + 2H$)²⁺;

TLC: Rf 0.19 ($CHCl_3$: MeOH: NH_4OH = 80:10:1)。

実施例 19-04

20 N^1 -(2-アゼパン-1-イルキノリン-4-イル)- N^2 , N^2 -ジメチル
エタン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO- d_6): δ 7.80 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.33 (m, 2H), 6.99 (m, 1H), 6.46 (t,
 J = 5.1 Hz, 1H), 5.81 (s, 1H), 3.69 (t, J = 6.0 Hz, 4H), 3.31 (m, 2H), 2.53 (t, J = 6.9
Hz, 2H), 2.21 (s, 6H), 1.74 (m, 4H), 1.47 (m, 4H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 313 ($M + H$)⁺, 241, 157 ($M + 2H$)²⁺;

25 TLC: Rf 0.22 ($CHCl_3$: MeOH: NH_4OH = 80:10:1)。

実施例 19-05

N^1 -(1-アゼパン-1-イルイソキノリン-3-イル)- N^2 , N^2 -ジメチルグリシンアミド

NMR(DMSO- d_6): δ 9.33 (s, 1H), 7.98 (d, J = 8.7 Hz, 1H), 7.81 (s, 1H), 7.70 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.54 (dd, J = 8.4, 6.6 Hz, 1H), 7.33 (dd, J = 8.7, 6.6 Hz, 1H), 3.65 (m, 4H), 3.10 (s, 2H), 2.30 (s, 6H), 1.84 (m, 4H), 1.64 (m, 4H);

MS (ESI, Pos, 20 V): 327 ($M + H$)⁺, 242, 164;

TLC: R_f 0.48 (CHCl₃: MeOH = 10:1)。

10 実施例 19-06

N^1 -(1-アゼパン-1-イルイソキノリン-3-イル)- N^2 , N^2 -ジメチルエタン-1, 2-ジアミン

15 NMR(DMSO- d_6): δ 7.78 (d, J = 8.4 Hz, 1H), 7.37 (d, J = 7.8 Hz, 1H), 7.29 (dd, J = 7.8, 6.6 Hz, 1H), 6.95 (dd, J = 8.4, 6.6 Hz, 1H), 6.00 (s, 1H), 5.64 (t, J = 5.4 Hz, 1H), 3.95 (m, 4H), 3.25 (dt, J = 5.4, 6.3 Hz, 2H), 2.42 (t, J = 6.3 Hz, 2H), 2.17 (s, 6H), 1.82 (m, 4H), 1.63 (m, 4H);

MS (ESI, Pos. 20 V): 313 ($M + H$)⁺, 157 ($M + 2H$)²⁺;

HPLC 条件: A; HPLC 保持時間 (分): 2.85;

TLC: R_f 0.48 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

20

実施例 19-07

1-(4-アゼパン-1-イル-6-クロロ-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) アゼパン

NMR(DMSO- d_6): δ 1.46 (m, 8H), 1.65 (m, 8H), 3.61 (q, J = 5.95 Hz, 8H);

25 MS (ESI, Pos. 20 V): 312, 310 ($M + H$)⁺;

TLC: R_f 0.77 (Hexane: AcOEt = 3:1)。

実施例 19-08

N-(4-アゼパン-1-イル-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン・二塩酸塩

5 NMR(DMSO-d₆): δ 1.49 (m, 4H), 1.73 (m, 4H), 3.00 (m, 2H), 3.63 (q, J = 6.00 Hz, 2H), 3.77 (m, 4H), 8.26 (m, 2H), 8.41 (s, 1H), 8.69 (m, 1H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 237 (M + H)⁺;

TLC: R_f 0.17 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

10 実施例 19-09

N-(4-アゼパン-1-イル-6-クロロ-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン・二塩酸塩

NMR(CD₃OD): δ 1.60 (m, 4H), 1.80 (m, 4H), 3.21 (t, J = 5.77 Hz, 2H), 3.79 (m, 6H);

15 MS(ESI, Pos, 20 V): 273, 271 (M + H)⁺;

TLC: R_f 0.23 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

実施例 19-10

20 N-(4-アゼパン-1-イル-6-メトキシ-1, 3, 5-トリアジン-2-イル) エタン-1, 2-ジアミン・二塩酸塩

NMR(CD₃OD): δ 1.62 (m, 4H), 1.85 (m, 4H), 3.22 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.77 (t, J = 6.00 Hz, 2H), 3.87 (m, 4H), 4.11 (s, 3H);

MS(ESI, Pos, 20 V): 267 (M + H)⁺;

TLC: R_f 0.27 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

25

実施例 19-11

N-〔5-(アゼパン-1-イルメチル)ピリミジン-2-イル〕エタン-
1, 2-ジアミン・三塩酸塩

NMR(DMSO-d₆): δ 1.59 (m, 4H), 1.81 (m, 4H), 2.98 (m, 4H), 3.27 (m, 2H), 3.57
(m, 2H), 4.16 (d, J = 5.10 Hz, 2H), 7.86 (m, 1H), 8.22 (m, 3H), 8.61 (s, 2H), 11.22
(m, 1H);

MS(LC-MS, APCI, Pos. 20 V): 250 (M + H)⁺, 151;

TLC: R_f 0.46 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:20:4)。

実施例 19-12

N¹-(4-シクロヘプチルキナゾリン-2-イル)-N², N²-ジメチルエ
タン-1, 2-ジアミン

NMR(DMSO-d₆): δ 7.97 (d, J = 8.1 Hz, 1H), 7.61 (m, 1H), 7.42 (d, J = 6.9 Hz,
1H), 7.17 (m, 1H), 6.85 (m, 1H), 3.62 (m, 1H), 3.43 (dt, J = 6.0, 6.6 Hz, 2H), 2.44 (t,
J = 6.6 Hz, 2H), 2.18 (s, 6H), 2.00-1.57 (m, 12H);

MS(ESI, Pos. 20 V): 313 (M + H)⁺, 157 (M + 2H)²⁺, 102;

TLC: R_f 0.46 (CHCl₃: MeOH: NH₄OH = 80:10:1)。

〔生物学的実施例〕

一般式 (I) および (II) で示される本発明化合物の有効性は、例えば、以
下の実験によって証明された。全体の操作は、基本的な遺伝子工学的手法に
基づき、遺伝子高発現細胞を作製し、常法となっている方法を活用した。ま
た、本発明の測定方法は、以下のように、本発明化合物を評価するために、
測定精度の向上および／または測定感度の改良を加えたものである。以下に
詳細な実験方法を示した。

先述したように、HIVがCD4陽性細胞上の受容体であるCXCR4あ
るいはCCR5に結合することを阻害する化合物のスクリーニングをするた

めには、H I Vウイルスを用いたアッセイ系で行うことがより直接的な手法である。しかし、H I Vウイルスを大量スクリーニングに使用することは、その取り扱いの難しさから実用的ではない。一方、T細胞指向性(X 4) H I V-1とS D F-1が共にC X C R 4に結合することから、H I V側とS D F-1側双方のC X C R 4結合部位、並びにC X C R 4側のS D F-1およびH I V結合部位には、何らかの共通する特徴があるものと予測し得る。したがって、既存の抗A I D S薬(逆転写酵素阻害薬やプロテアーゼ阻害薬)と異なる作用機序であるH I Vウイルスの細胞への吸着を阻害する化合物を発見するため、H I Vの代わりにC X C R 4の内因性リガンドであるS D F-1を用いたアッセイ系が利用可能である。

具体的には、S D F-1とC X C R 4の結合を阻害する化合物をスクリーニングする系として、例えば、ヨードラベルしたS D F-1とC X C R 4を発現していることが知られているヒトT細胞株との結合を測定する系が実施可能である。マクロファージ(R 5) H I Vと、R A N T E S、M I P-1 α 、M I P-1 β が共にC C R 5に結合することから、同様な考え方が可能である。

[実験方法]

実験例1：ヒトS D F-1のC E M細胞への結合に対する阻害実験

結合緩衝液中(H E P E S、B S A含有)でヒトT細胞株C E M細胞に被験化合物と 125 I-S D F-1(N E N)を添加し4℃で60分間インキュベートした。反応させたC E M細胞をG F/B membrane filter plate(Packard)で急速濾過して吸着させ、P B Sで3回洗浄した後、乾燥させMicroscint+20(Packard)を加えた。C E M細胞に結合した放射エネルギーをTop Count(Packard)を用いて測定し、試験化合物の阻害率(%)を以下の計算式により算出した。

$$\text{阻害率} = (E_t - E_a) / (E_t - E_c) \times 100$$

E t : 被験化合物を添加しなかった時の放射エネルギー

E c : 被験化合物として¹²⁵I-SDF-1の1000倍量の非放射
 5 性SDF-1 (Pe pro Tech) を添加した時の放射能量

E a : 被験化合物を添加した時の放射能量

実施例に示したすべての本発明化合物は、10 μM の濃度で50%以上の
 5 阻害率を示した。例えば、実施例1(41)および実施例4の化合物のIC₅₀
 値はそれぞれ0.20 μMおよび0.15 μMであった。

製剤例 1

以下の各成分を常法により混合した後打錠して、一錠中に10 mgの活性
 10 成分を含有する錠剤1万錠を得た。

・ 2- (2-ジメチルアミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピネー 1-イル) ピリミジン 100 g
・ カルボキシメチルセルロースカルシウム (崩壊剤) 20.0 g
・ ステアリン酸マグネシウム (潤滑剤) 10.0 g
15 15 ・ 微結晶セルロース 870 g

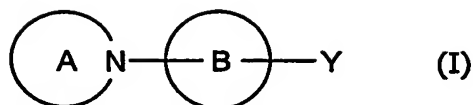
製剤例 2

以下の各成分を常法により混合した後、除塵フィルターでろ過し、5 ml
 ずつアンプルに充填し、オートクレーブで加熱滅菌して、1アンプル中20
 mgの活性成分を含有するアンプル1万本を得た。

20 20 ・ 2- (2-ジメチルアミノエチルアミノ) -4- (パーヒドロアゼピネー 1-イル) ピリミジン 200 g
・ マンニトール 2 kg
・ 蒸留水 50 L

請求の範囲

1. 一般式 (I)



5 (式中、環Aは置換基を有していてもよい含窒素複素環を表わし、環Bは置換基を有していてもよい同素環または置換基を有していてもよい複素環を表わし、Yは置換基を有していてもよい炭化水素基、置換基を有していてもよい複素環基、保護されていてもよいアミノ基、保護されていてもよい水酸基または保護されていてもよいメルカプト基を表わす。)

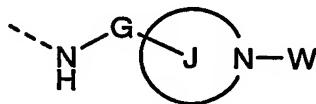
10 で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ。

2. 環Aが置換基を有していてもよい5～10員含窒素複素環である請求の範囲1記載の化合物。

15

3. 環Bが置換基を有していてもよい含窒素複素環である請求の範囲1記載の化合物。

4. Yが

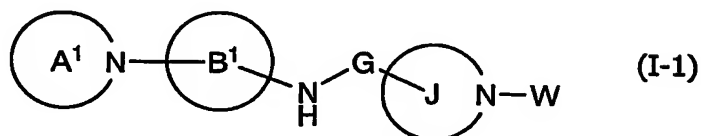


20

(式中、Gは結合手または主鎖の原子数1～3のスペーサーを表わし、環Jは置換基を有していてもよい4～7員含窒素複素環を表わし、Wは水素原子、

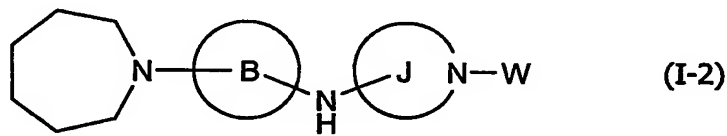
置換基を有していてもよい炭化水素基または置換基を有していてもよい複素環基を表わす。)である請求の範囲1記載の化合物。

5. 一般式 (I-1)



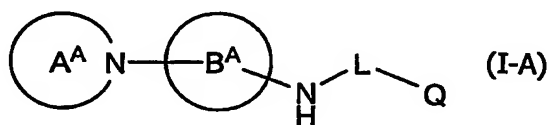
(式中、環 A^1 は置換基を有していてもよい5～10員含窒素飽和複素環または置換基を有していてもよい1個の二重結合を含有する5～10員含窒素複素環を表わし、環 B^1 は置換基を有していてもよい6～11員含窒素単環または二環式複素環を表わし、その他の記号は請求の範囲4記載の記号と同じ意味を表わす。)である請求の範囲1記載の化合物。

6. 一般式 (I-2)



(式中、すべての記号は請求の範囲1および4記載の記号と同じ意味を表わす。)である請求の範囲1記載の化合物。

7. 一般式 (I-A)

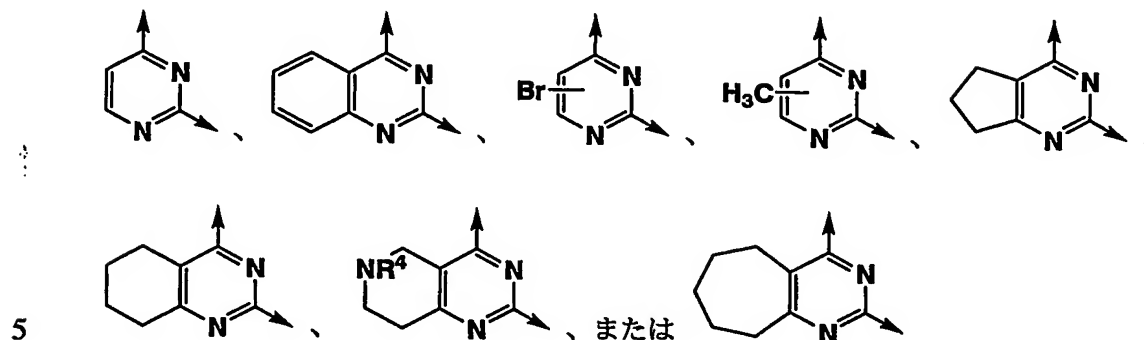


(式中、環 A^{A} は少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、

4～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環を表わし、

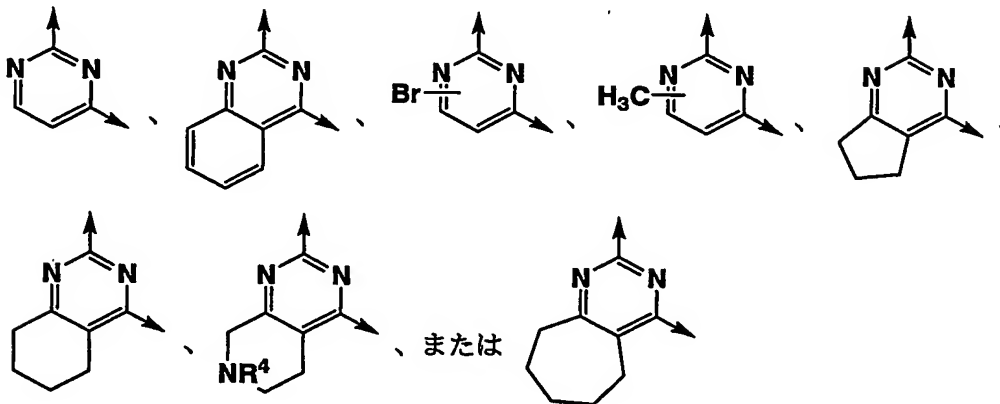
環B^AはB^{A1}またはB^{A2}を表わし、

B^{A1}は



を表わし、

B^{A2}は



(基中、R⁴は、(i) 水素原子、(ii) 1～5個のR¹⁰によって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル (iii) 1～5個のR³によって置換されてもよいC3～8炭素環、(iv) 1～5個のR³によって置換されてもよい、1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～15員の複素環、(v) COR⁵ (基中、R⁵はC1～15アルキル、C2～15アルケニル、C2～

- 1 5 アルキニルまたはフェニルを表わす。)、または (vi) COOR^6 (基中、 R^6 はC 1～1 5 アルキル、C 2～1 5 アルケニル、C 2～1 5 アルキニルまたはフェニルを表わす。) を表わし、上向きの矢印は環A^Aとの結合部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わす。) を表わし、
- 5 Lは、(1) 結合手、(2) C 1～8 アルキレン、C 2～8 アルケニレンもしくはC 2～8 アルキニレン (該アルキレン、アルケニレンおよびアルキニレンはそれぞれ1～5個の R^{10} によって置換されてもよい。)、または(3) R^3 によって置換されてもよいC 3～8 炭素環を表わし、
- 10 Qは、(1) NR^1R^2 (基中、 R^1 および R^2 はそれぞれ独立して、(i) 水素原子、(ii) 1～5個の R^{10} によって置換されてもよいC 1～1 5 アルキル、C 2～1 5 アルケニルもしくはC 2～1 5 アルキニル (iii) 1～5個の R^3 によって置換されてもよいC 3～8 炭素環、または (iv) 1～5個の R^3 によって置換されてもよい、1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有する5～1 5 員の複素環を表わす。) または(2)
- 15 環C (環Cは少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～2個の窒素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい4～1 5 員の複素環を表わし、環Cは1～5個の R^3 によって置換されてもよい。) を表わし、
- 20 複数の R^3 は、それぞれ独立して(1) C 1～1 5 アルキル、C 2～1 5 アルケニルまたはC 2～1 5 アルキニル (該アルキル、アルケニルおよびアルキニルは1～5個の R^{10} によって置換されてもよい。)、(2) オキソ、または(3) R^{10} を表わし、
- 複数の R^{10} は、それぞれ独立して(1) OR^{11} 、(2) OCOR^{12} 、(3) O
- 25 COOR^{13} 、(4) $\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ 、(5) $\text{NR}^{16}\text{COR}^{12}$ 、(6) $\text{NR}^{16}\text{CONR}^{14}\text{R}^{15}$ 、(7) $\text{NR}^{16}\text{COOR}^{13}$ 、(8) COOR^{13} 、(9) COR^{12} 、(1

- 0) $\text{CONR}^{14}\text{R}^{15}$ 、(11) SO_2R^{12} 、(12) SOR^{22} 、(13) SO_2
 $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(14) $\text{NR}^{16}\text{SO}_2\text{R}^{12}$ 、(15) $\text{B}(\text{OH})_2$ 、(16) SR
 11 、(17) ハロゲン原子、(18) ニトロ、(19) シアノ、または (20)
 5 環D (上記の基中、 R^{11} は (i) 水素原子、(ii) C1～15アルキル、C2
 ～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル (該アルキル、アルケニル
 およびアルキニルは1～5個のハロゲン原子、 $\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$ 、 OR^{21} 、 SR^{21} 、 COOR^{13} 、または環Dによって置換されてもよい。)、または (iii) 環D
 を表わし、
 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、それぞれ独立して (i) 水素原子、
 10 (ii) 環Dによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケ
 ニルもしくはC2～15アルキニル、または (iii) 環Dを表わし、
 環Dは、C3～15単環、二環もしくは三環式炭素環、または1～4個の窒
 素原子、1～2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有する5～
 15 15員の単環、二環もしくは三環式複素環を表わし、
 また、環Dは、以下の(1)～(22)から選択される1～5個の基によっ
 て置換されてもよい；
 (1) C1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アル
 キニル (該アルキル、アルケニルおよびアルキニルは1～5個の OR^{21} 、 O
 COR^{22} 、 OCOOR^{23} 、 $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{COR}^{22}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{CONR}^{24}$
 20 R^{25} 、 $\text{NR}^{26}\text{COOR}^{23}$ 、 COOR^{23} 、 COR^{22} 、 $\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 SO_2
 R^{22} 、 SOR^{22} 、 $\text{SO}_2\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、 $\text{NR}^{26}\text{SO}_2\text{R}^{22}$ 、 $\text{B}(\text{OH})_2$ 、 S
 R^{21} 、ハロゲン原子、ニトロまたはシアノによって置換されてもよい。)、(2)
 オキソ、(3) OR^{21} 、(4) OCOR^{22} 、(5) OCOOR^{23} 、(6) NR^{24}
 R^{25} 、(7) $\text{NR}^{26}\text{COR}^{22}$ 、(8) $\text{NR}^{26}\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(9) NR^{26}
 25 COOR^{23} 、(10) COOR^{23} 、(11) COR^{22} 、(12) $\text{CONR}^{24}\text{R}^{25}$
 5、(13) SO_2R^{22} 、(14) SOR^{22} 、(15) $\text{SO}_2\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ 、(16)

- $\text{NR}^{26}\text{SO}_2\text{R}^{22}$ 、(17) $\text{B}(\text{OH})_2$ 、(18) SR^{21} 、(19) ハロゲン原子、(20) ニトロ、(21) シアノまたは (22) 環E (上記の基中、 R^{21} は (i) 水素原子、(ii) COR^{22} 、 $\text{NR}^{24}\text{R}^{25}$ もしくは環Eによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニルまたは (iii) 環Eを表わし、
 5 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} および R^{26} は、それぞれ独立して (i) 水素原子、(ii) 環Eによって置換されてもよいC1～15アルキル、C2～15アルケニルもしくはC2～15アルキニル、または (iii) 環Eを表わし、
 環Eは、C3～15単環、二環もしくは三環式炭素環、または1～4個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有する5～
 10 15員の単環、二環もしくは三環式複素環を表わし、
 また、環Eは1～5個の (i) フェニルによって置換されてもよいC1～15アルキル、(ii) ハロゲン原子、(iii) フェニル、(iv) C1～15アルコキシ、(v) 水酸基、(vi) アミノ基、(vii) モノ (C1～8アルキル) アミノ基または (viii) ジ (C1～8アルキル) アミノ基によって置換されてもよい。) を表わし、
 15 環A^aは、1～5個の R^a によって置換されてもよく、
 環B^aは、1～5個の R^b によって置換されてもよく、
 R^a および R^b は、それぞれ独立して R^3 に示される基と同じ基を表わす。
 20 ただし、以下の(1)～(6)の化合物を除く：
 (1) N-[4-(4-モルホリニル)-2-キナゾリニル]-1,2-エタンジアミン・二塩酸塩、
 (2) N, N-ジメチル-N'-[2-(4-フェニル-1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1,2-エチレンジアミン、
 25 (3) N-[(3,4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-2-イル)メチル]-N'-[2-(1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1,3-

プロパンジアミン、

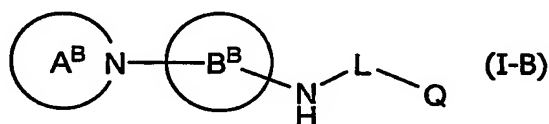
(4) N-[(3,4-ジヒドロ-2H-1-ベンゾピラン-2-イル)メチル]-N'-[2-(1-ピペリジニル)-4-ピリミジニル]-1,3-プロパンジアミン・シュウ酸塩、

5 (5) N,N-ジエチル-N'-[2-(1-ピロリジニル)-4-キナゾリニル]-1,2-エタンジアミンおよび

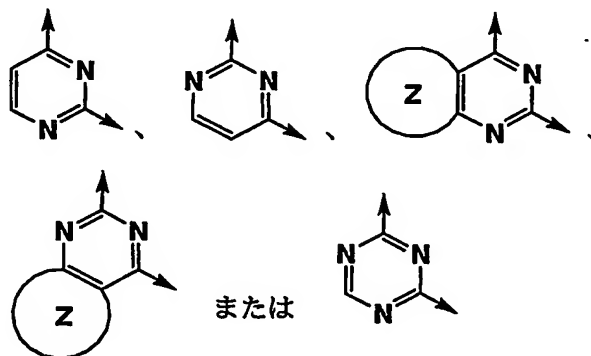
(6) N,N-ジエチル-N'-[2-(1-ピロリジニル)-4-キナゾリニル]-1,2-エタンジアミン・二塩酸塩。)

10 で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ。

8. 一般式 (I-B)



15 (式中、環A^Bは少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1～3個の窒素原子、1～2個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい、7～15員の飽和または1個の二重結合を含有する単環、二環または三環式複素環を表わし、環B^Bは



(基中、環ZはC 5～10単環もしくは二環式炭素環または1～2個の窒素原子、1個の酸素原子および／または1個の硫黄原子を含有してもよい5～10員の単環もしくは二環式複素環を表わし、上向きの矢印は環A^Bとの結合部位を表わし、右下向きの矢印はLと結合した窒素原子との結合部位を表わす。)

を表わし、環A^Bは1～5個のR^aによって置換されてもよく、環B^Bは1～5個のR^bによって置換されてもよく、R^a、R^bおよびその他の記号は請求の範囲7記載の記号と同じ意味を表わす。

ただし、以下の化合物(1)～(7)を除く；

- 10 (1) N-[4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル) チエノ [3, 2-d] ピリミジン-2-イル] -1, 4-ブタンジアミン・二塩酸塩、
- (2) 7-[4-[4, 6-ビス(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル) -1, 3, 5-トリアジン-2-イル] アミノ-2H-1, 2, 3-トリアゾール-2-イル] -3-フェニル-2H-1-ベンゾピラン-2-オン、
- 15 (3) 4-エトキシ-6-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル) -N-[3-(4-モルホリニル) プロピル] -1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- (4) 4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル) -6-メチル-N-[3-(4-モルホリニル) プロピル] -1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- 20 (5) 4-クロロ-6-(ヘキサヒドロ-1H) -アゼピン-1-イル) -N-[2-(4-モルホリニル) エチル] -1, 3, 5-トリアジン-2-アミン、
- 25 (6) 4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル) -6-メトキシ-N-[3-(4-モルホリニル) プロピル-1, 3, 5-トリアジン-2-

アミンおよび

(7) N-[4-(ヘキサヒドロ-1H-アゼピン-1-イル)チエノ[3,2-d]ピリミジン-2-イル-1,4-ブタンジアミン。)

5 示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグ。

9. (1) N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)エタン-1,2-ジアミン、

10 (2) N¹-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-N², N²-ジメチルエタン-1,2-ジアミン、

(3) 4-アゼパン-1-イル-N-((3S)-1-シクロヘキシルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン、

(4) 4-アゼパン-1-イル-N-((3S)-1-ベンジルピロリジン-3-イル)ピリミジン-2-アミン、

15 (5) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-(2-エチルブチル)ピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、

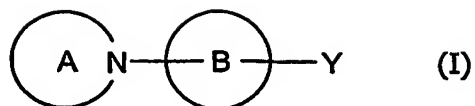
(6) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-シクロヘキシルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、

20 (7) 4-アゼパン-1-イル-N-[(3S)-1-テトラヒドロ-2H-ピラン-4-イルピペリジン-3-イル]ピリミジン-2-アミン、

(8) 4-(3S)-3-[(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)アミノ]ピペリジン-1-イルシクロヘキサノールまたは

25 (9) (3S)-N-(4-アゼパン-1-イルピリミジン-2-イル)-1'-(シクロヘキシルカルボニル)-1,4'-ビピペリジン-3-アミンで
ある請求の範囲1、7または8記載の化合物。

10. 一般式 (I)



(式中、すべての記号は請求の範囲1記載の記号と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、また
5 たはそれらのプロドラッグを含有してなる医薬組成物。

11. CXCR4調節剤である請求の範囲10記載の医薬組成物。

12. CXCR4調節剤がCXCR4拮抗剤である請求の範囲11記載の
10 医薬組成物。

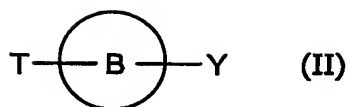
13. ヒト免疫不全ウィルス感染の予防および／または治療剤である請求
の範囲12記載の医薬組成物。

14. 後天性免疫不全症候群の予防および／または治療剤である請求の範
15 囲13記載の医薬組成物。

15. 再生医療用剤である請求の範囲10記載の医薬組成物。

16. 再生医療用剤が移植医療用剤である請求の範囲15記載の医薬組成
20 物。

17. 一般式 (II)



(式中、Tは、



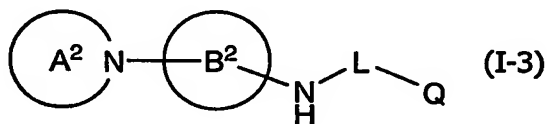
(式中、 R^{101} および R^{102} は、それぞれ独立して、水素原子または置換基を
5 有していてもよい炭化水素基を表わし、環Aは請求の範囲1記載の記号と同じ
意味を表わす。)を表わし、その他の記号は請求の範囲1記載の記号と同じ
意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、ま
たはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXC R 4調節剤。

10

18. CXC R 4調節剤がCXC R 4拮抗剤である請求の範囲17記載の
剤。

19. 一般式(I-3)



15

(式中、環 A^2 は少なくとも1個の窒素原子を含有し、さらに1~3個の窒素
原子、1~2個の酸素原子および/または1個の硫黄原子を含有してもよい、
4~15員の単環、二環または三環式複素環を表わし、環 B^2 は少なくとも1
個の窒素原子を含有し、さらに1~3個の窒素原子、1~2個の酸素原子お
20 よび/または1個の硫黄原子を含有してもよい5~15員の単環、二環また
は三環式複素環を表わし、環 A^2 は1~5個の R^a によって置換されてもよく、

環B²は1～5個のR^bによって置換されてもよく、R^a、R^bおよびその他の記号は請求の範囲7記載の記号と同じ意味を表わす。)

で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤。

5

20. CXCR4拮抗剤である請求の範囲19記載のCXCR4調節剤。

21. 請求の範囲7に記載の一般式(I-A)で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを
10 有効成分とするCXCR4調節剤。

22. CXCR4拮抗剤である請求の範囲21記載のCXCR4調節剤。

23. 請求の範囲8に記載の一般式(I-B)で示される化合物、その塩、
15 そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグを有効成分とするCXCR4調節剤。

24. CXCR4拮抗剤である請求の範囲23記載のCXCR4調節剤。

20 25. 炎症・免疫性疾患、アレルギー性疾患、感染症、HIV感染もしくはそれに随伴する疾患、精神・神経性疾患、脳疾患、心・血管性疾患、代謝性疾患または癌疾患の予防および／または治療剤である請求の範囲17または19記載のCXCR4調節剤。

25 26. HIV感染もしくはそれに随伴する疾患の予防および／または治療剤である請求の範囲25記載のCXCR4調節剤。

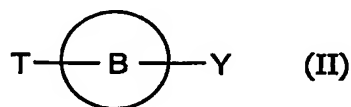
27. 再生医療用である請求の範囲17または19記載のCXCR4調節剤。

5 28. 請求の範囲1、7、8または17記載の化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグと、逆転写酵素阻害薬、プロテアーゼ阻害薬、CCR2拮抗薬、CCR3拮抗薬、CCR4拮抗薬、CCR5拮抗薬、フュージョン阻害薬、HIV-1の表面抗原に対する抗体、およびHIV-1のワクチンから選択される1種または2種
10 以上とを組み合わせる医療。

29. 逆転写酵素阻害薬が、ジドブジン、ジダノシン、ザルシタビン、スタブジン、ラミブジン、アバカビル、アデフォビル、ジビボキシル、エントリシタビン、テノフォビル、ネビラピン、デラビルジン、エファビレンツおよびカプラヴィリンから選択される1種または2種以上である請求の範囲2
15 8記載の医療。

30. プロテアーゼ阻害薬が、インジナビル、リトナビル、ネルフィナビル、サキナビル、アンプリナビル、ロピナビルおよびティプラナビルから選
20 択される1種または2種以上である請求の範囲28記載の医療。

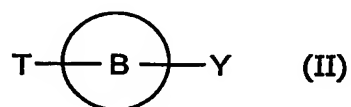
31. 一般式 (II)



(式中、すべての記号は請求の範囲1および17記載の記号と同じ意味を表

わす。)で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグの有効量を哺乳動物に投与することを特徴とする哺乳動物における CXCR4 を拮抗する方法。

5 32. CXCR4 拮抗剤を製造するための一般式 (II)



(式中、すべての記号は請求の範囲 1 および 17 記載の記号と同じ意味を表わす。)で示される化合物、その塩、そのN-オキシド体もしくはその溶媒和物、またはそれらのプロドラッグの使用。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP03/15718

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl⁷ C07D213/74, 401/14, 403/04, 403/14, 471/04, 401/12,
401/04, 403/12, 405/14, 409/14, 417/14, 405/12, 413/04,
413/12, 215/42, 493/04, 493/10, 495/04, 473/16, 251/50,

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl⁷ C07D213/74, 401/14, 403/04, 403/14, 471/04, 401/12,
401/04, 403/12, 405/14, 409/14, 417/14, 405/12, 413/04,
413/12, 215/42, 493/04, 493/10, 495/04, 473/16, 251/50,

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

REGISTRY (STN), CAPLUS (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y A	WO 00/56729 A1 (ANORMED INC.), 28 September, 2000 (28.09.00), All references; in particular, description, pages 4 to 5, 7 to 9, 17 to 18 & EP 1163238 A1	1-8, 10-30, 32 28-30 9
X Y A	WO 02/22599 A2 (ANORMED INC.), 21 March, 2002 (21.03.02), All references; in particular, description, pages 6 to 9 & EP 1317451 A1	1-8, 10-30, 32 28-30 9

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not
considered to be of particular relevance
"E" earlier document but published on or after the international filing
date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is
cited to establish the publication date of another citation or other
special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other
means
"P" document published prior to the international filing date but later
than the priority date claimed

"I" later document published after the international filing date or
priority date and not in conflict with the application but cited to
understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be
considered novel or cannot be considered to involve an inventive
step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be
considered to involve an inventive step when the document is
combined with one or more other such documents, such
combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
27 January, 2004 (27.01.04)

Date of mailing of the international search report
17 February, 2004 (17.02.04)

Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP03/15718

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	WO 01/040227 A1 (Ono Pharmaceutical Co., Ltd.), 07 June, 2001 (07.06.01), All references; in particular, pages 184 to 185, 304, 311 to 312, 320, 328, 336, 343, 344 to 345, 351 to 352, 359 to 362, 378 & EP 1236726 A1	1-3,10-18,27 28-30
X Y	JP 2002-348288 A (Ono Pharmaceutical Co., Ltd.), 04 December, 2002 (04.12.02), All references; in particular, page 33, compound 2(33); page 35, compound 2(54); page 36, compound 2(62) (Family: none)	1-3,10-18,27 28-30
X	WO 2002/45652 A2 (MERCK & CO.), 13 June, 2002 (13.06.02), All references; in particular, description, page 105, compound 25-4 & US 2002/137755 A1 & EP 1341540 A2	1-8,10
X	GUPTA, C.M.; BHADURI, A.P.; KHANNA, N.M.; Drugs acting on the central nervous system. Syntesis of substituted quinazolinones and quinazolines and triazepino- and triazocinoquinazolinones., Journal of medicinal Chemistry, 1968, Vol.11, No.2, pages 392 to 395; in particular, page 393, compound 23	1-8,10,25,32
X	GB 1113918 A (FARBENFABRIKEN BAYER AG.), 15 May, 1968 (15.05.68), In particular, page 5, compound k (Family: none)	1-8
P,X	WO 2003/062236 A1 (WARNER-LAMBERT CO.), 31 July, 2003 (31.07.03), In particular, description, pages 44 to 45; page 83, example 78 (Family: none)	1-8,10-27,32

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP03/15718

Box I Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☒ Claims Nos.: 31

because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

It pertains to methods for treatment of the human body by therapy that are specified as a subject matter which this International Searching Authority is not required, under the provisions of Article 17(2)(a)(i) of the PCT and Rule 39.1(iv) of the Regulations under the PCT, to search.

2. ☐ Claims Nos.:

because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

3. ☐ Claims Nos.:

because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box II Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

The general formula of the compounds as set forth in claim 1 has no definite fundamental skeleton but is expressed as a whole in variable groups including a large number of alternatives. The structural feature common to compounds represented by this general formula exclusively resides in having a cyclic structure directly attached to the N atom in an N-containing heterocycle group. As reported in WO 01/040227 A1, however, compounds having a cyclic structure directly attached to the N atom in an N-containing heterocycle have been publicly known. It is also publicly known that these compounds have an antagonism to a chemokine receptor. Considering contribution over the prior art, therefore, the above-described structural feature cannot (continued to extra sheet)

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☒ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest.
☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP03/15718

Continuation of A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

(International Patent Classification (IPC))

Int.Cl⁷ 239/42, A61K31/55, 31/506, 31/551, 31/4725, 31/517, 31/553, 31/4709, 31/444, 31/519, 31/506, A61P3/00, 9/00, 25/00, 29/00, 31/00, 31/18, 35/00, 37/00, 37/08, 43/00

(According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC)

Continuation of B. FIELDS SEARCHED

Minimum Documentation Searched (International Patent Classification (IPC))

Int.Cl⁷ 239/42, A61K31/55, 31/506, 31/551, 31/4725, 31/517, 31/553, 31/4709, 31/444, 31/519, 31/506, A61P3/00, 9/00, 25/00, 29/00, 31/00, 31/18, 35/00, 37/00, 37/08, 43/00

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C. Continuation of Box No. II

be considered as a special technical feature. Since there is no other technical feature common to the compounds as set forth in claim 1, the inventions according to claim 1 cannot be considered as being so linked as to form a single general inventive concept.

Similarly, the inventions as set forth in claims 2 to 30 and 32 have no special technical feature in common and, therefore, cannot be considered as a group of inventions so linked as to form a single general inventive concept.

D. <Search on prior art document>

The general formula of the compounds as set forth in claim 1 has no definite fundamental skeleton but is expressed as a whole in variable groups including a large number of alternatives. Thus, it includes a great number of compounds. Even though the disclosure about them in the description is taken into consideration, it cannot be considered that the inventions as set forth in the claim comply with the requirements in accordance with PCT Articles 5 and 6 to such an extent that no meaningful international search can be carried out on prior art documents. Such being the case, prior art documents were searched in the international search report exclusively on the compounds represented by the general formula as set forth in claim 6, the compound as set forth in claim 9 and nitrogen-containing heterocyclic compounds having an inhibitory effect on a chemokine receptor, by reference to the statement in the description too.

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁷ C07D213/74, 401/14, 403/04, 403/14, 471/04, 401/12, 401/04, 403/12, 405/14, 409/14, 417/14, 405/14, 409/14, 417/14, 405/12, 413/04, 413/12, 215/42, 493/04, 493/10, 495/04, 473/16, 251/50, 239/42, A61K31/55, 31/506, 31/551, 31/4725, 31/517, 31/553, 31/4709, 31/444, 31/519, 31/506,

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁷ C07D213/74, 401/14, 403/04, 403/14, 471/04, 401/12, 401/04, 403/12, 405/14, 409/14, 417/14, 405/14, 409/14, 417/14, 405/12, 413/04, 413/12, 215/42, 493/04, 493/10, 495/04, 473/16, 251/50, 239/42, A61K31/55, 31/506, 31/551, 31/4725, 31/517, 31/553, 31/4709, 31/444, 31/519, 31/506,

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)
REGISTRY (STN), CAPLUS (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X Y A	WO 00/56729 A1 (ANORMED INC.) 2000. 09. 28 全文献、特に、明細書第4-5頁、第7-9頁、第17-18頁などを参 照。 &EP 1163238 A1	1-8, 10-30, 32 28-30 9
X Y A	WO 02/22599 A2 (ANORMED INC.) 2002. 03. 21 全文献、特に、明細書第6-9頁などを参照。 &EP 1317451 A1	1-8, 10-30, 32 28-30 9

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)
「O」 口頭による開示、使用、展示等に関する文献
「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

27. 01. 2004

国際調査報告の発送日

17. 2. 2004

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

齋藤 恵

4P

9164

電話番号 03-3581-1101 内線 3490

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X Y	WO 01/040227 A1 (小野薬品工業株式会社) 2001. 06. 07 全文献、特に、第184-185頁、第304頁、第311-312頁、第320頁、 第328頁、第336頁、第343頁、第344-345頁、第351-352頁、第359-3 62頁、第378頁などを参照。 &EP 1236726 A1	1-3, 10-18, 27 28-30
X Y	JP 2002-348288 A (小野薬品工業株式会社) 2002. 12. 04 全文献、特に、第33頁の化合物2(33)、第35頁の化合物2(54)、第 36頁の化合物2(62)などを参照。 (ファミリーなし)	1-3, 10-18, 27 28-30
X	WO 2002/45652 A2 (MERCK & CO.) 2002. 06. 13 全文献、特に、明細書第105頁の化合物25-4などを参照。 &US 2002/137755 A1 &EP 1341540 A2	1-8, 10
X	GUPTA, C. M.; BHADURI, A. P.; KHANNA, N. M. Drugs acting on the central nervous system. Syntheses of substituted quinazolinones and quinazolines and triazepino- and triazocinoquinazolinones. Journal of Medicinal Chemistry, 1968, Vol.11, No.2, p. 392-395 特に、p. 393の化合物23などを参照。	1-8, 10, 25, 32
X	GB 1113918 A (FARBENFABRIKEN BAYER AKTIENGESELLSCHAFT) 1968. 05. 15 特に、第5頁のcompound kを参照。 (ファミリーなし)	1-8
PX	WO 2003/062236 A1 (WARNER-LAMBERT COMPANY) 2003. 07. 31 特に、明細書第44-45頁、第83頁のEXAMPLE 78などを参照。 (ファミリーなし)	1-8, 10-27, 32

第Ⅰ欄 請求の範囲の一部の調査ができないときの意見 (第1ページの2の続き)

法第8条第3項 (PCT 17条(2)(a)) の規定により、この国際調査報告は次の理由により請求の範囲の一部について作成しなかった。

1. ☒ 請求の範囲 31 は、この国際調査機関が調査をすることを要しない対象に係るものである。つまり、
国際調査をすることを要しない国際出願の対象としてPCT第17条(2)(a)(i)およびPCT規則39.1(iv)に規定された治療による人体の処置方法に該当する。
2. ☐ 請求の範囲 は、有意義な国際調査をすることができる程度まで所定の要件を満たしていない国際出願の部分に係るものである。つまり、
3. ☐ 請求の範囲 は、従属請求の範囲であってPCT規則6.4(a)の第2文及び第3文の規定に従って記載されていない。

第Ⅱ欄 発明の単一性が欠如しているときの意見 (第1ページの3の続き)

次に述べるようにこの国際出願に二以上の発明があるところの国際調査機関は認めた。

請求の範囲1に記載された化合物の一般式は、一定の基本骨格を有しておらず、全体が多数の選択枝を含む可変の基で表現されている。そして、この一般式で表される化合物が共有する構造上の特徴は、N含有複素環のN原子と直結する環構造を有するという点のみである。しかし、WO 01/040227 A1にも記載されているように、N含有複素環のN原子と直結する環構造を有する化合物は公知であり、また、この化合物がケモカイン受容体拮抗作用を有することも公知である。このように、上記構造上の特徴は、先行技術に対する貢献を考慮した際に、特別の技術的特徴となり得ず、これ以外に、請求の範囲1に記載された化合物は共通する技術的特徴を有していない。したがって、請求の範囲1に記載された発明は、単一の発明概念を形成するように連関しているとはいえない。(続きあり)

1. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求の範囲について作成した。
2. ☒ 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。
3. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、手数料の納付のあった次の請求の範囲のみについて作成した。
4. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載されている発明に係る次の請求の範囲について作成した。

追加調査手数料の異議の申立てに関する注意

- ☐ 追加調査手数料の納付と共に出願人から異議申立てがあった。
☐ 追加調査手数料の納付と共に出願人から異議申立てがなかった。

A. 発明の属する分野の分類 の続き

A61P3/00, 9/00, 25/00, 29/00, 31/00, 31/18, 35/00, 37/00, 37/08, 43/00

B. 調査を行った分野 の続き

A61P3/00, 9/00, 25/00, 29/00, 31/00, 31/18, 35/00, 37/00, 37/08, 43/00

C. 第 I I 欄 の続き

請求の範囲 2-30、32 に記載された発明についても同様に、これらは特別の技術的特徴を共有しておらず、単一の一般的発明概念を形成するように連関している一群の発明であるとは認められない。

D. <先行技術文献調査について>

請求の範囲 1 に記載された化合物の一般式は、一定の基本骨格を有しておらず、全体が多数の選択枝を含む可変の基で表現され、極めて多数の化合物を含んでいる。これに対する、明細書の開示を併せて考慮しても、請求の範囲に記載された発明が、その全体にわたって有意義な先行技術文献調査が可能である程度に、PCT 第 5 条および第 6 条の要件を満たしているとはいえない。したがって、本国際調査報告においては、明細書の記載も参考にして、請求の範囲 6 に記載された一般式で表される化合物と、請求の範囲 9 に記載された化合物、および、ケモカイン受容体阻害作用を有する窒素含有複素環化合物に限定して先行技術文献調査を行った。